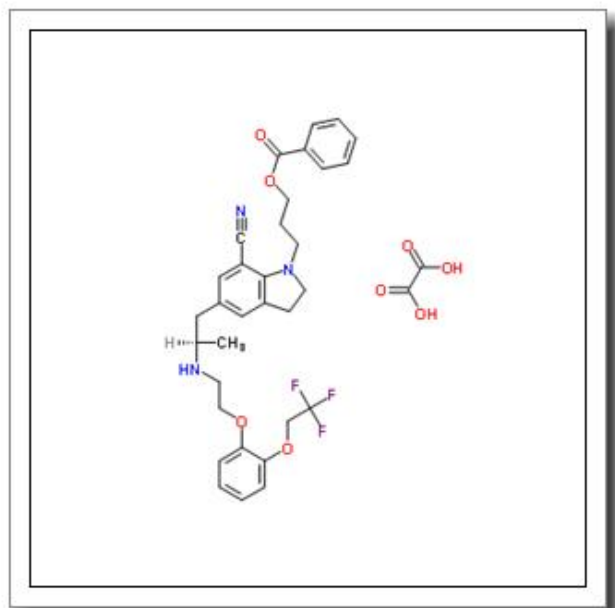


1-[3-(苯甲酰氧基)丙基]-2,3-二氢-5- [[2R)-2-[[2-[2-(2,2,2-三氟乙氧基)苯氧基]乙基]氨基]丙基]-1H-吲哚-7-甲腈乙 二酸盐

3-[7-cyano-5-[(2R)-2-[2-[2-(2,2,2-trifluoroethoxy)phenoxy]ethylamino]propyl]-2,3-dihydroindol-1-yl]propyl benzoate, oxalic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-[7-cyano-5-[(2R)-2-[2-[2-(2,2,2-trifluoroethoxy)phenoxy]ethylamino]propyl]-2,3-dihydroindol-1-yl]propyl benzoate, oxalic acid
中文名称	1-[3-(苯甲酰氧基)丙基]-2,3-二氢-5-[[2R)-2-[[2-[2-(2,2,2-三氟乙氧基)苯氧基]乙基]氨基]丙基]-1H-吲哚-7-甲腈乙二酸盐

CAS 号	885340-12-5
分子式	C ₃₄ H ₃₆ F ₃ N ₃ O ₈
分子量	671.66
纯度	≥ 96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为 3-[7-cyano-5-[(2R)-2-[2-[2-(2,2,2-trifluoroethoxy)phenoxy]ethylamino]propyl]-2,3-dihydroindol-1-yl]propyl benzoate, oxalic acid 的乙二酸盐形式，中文名称为 1-[3-(苯甲酰氧基)丙基]-2,3-二氢-5-[(2R)-2-[2-[2-(2,2,2-三氟乙氧基)苯氧基]乙基]氨基]丙基]-1H-吲哚-7-甲腈乙二酸盐。其 CAS 号为 885340-12-5，分子式为 C₃₄H₃₆F₃N₃O₈，分子量为 671.66。该化合物为白色至类白色结晶性粉末，纯度 ≥96%，具有明确的立体构型（R 构型）和复杂的多环结构，含氰基、三氟乙氧基及苯甲酸酯等官能团，表现出特定的溶解性和稳定性。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物是一种高选择性受体调节剂，其结构中的吲哚环和氨基丙基侧链赋予其与特定 G 蛋白偶联受体（如 5-HT 或肾上腺素能受体）结合的能力。三氟乙氧基和氰基的引入增强了其脂溶性和靶点亲和力，而乙二酸盐形式提高了其水溶性和制剂稳定性。在信号转导研究中，它可用于探究受体亚型的功能机制或作为先导化合物用于药物开发。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于神经科学和心血管疾病研究领域，具体包括：

- 作为工具药用于体外受体结合实验或细胞功能研究
- 在动物模型中评估其对特定受体通路的调控作用
- 作为药物化学中间体，用于优化活性分子的药代动力学性质
- 潜在应用于抗抑郁或抗高血压药物的开发

4. 储存条件与使用建议

储存条件：需避光保存于-20℃干燥环境中，开封后建议充氮密封。长期储存需置于惰性气体保护下。

使用建议：使用前需恢复至室温并避免反复冻融。建议用 DMSO 或乙醇配制母液

(浓度 10-50 mM)，后续用缓冲液稀释至工作浓度。实验时需佩戴防护装备，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。

5. 质量控制与安全信息

质量控制：通过 HPLC 测定纯度 $\geq 96\%$ ，LC-MS 验证分子量，NMR 确认结构。批次提供 COA（质量分析证书）及 MSDS（材料安全数据表）。

安全信息：本品属于有害化学品，可能对眼睛、皮肤和呼吸系统造成刺激。操作时需在通风橱中进行，穿戴实验服、手套和护目镜。若接触皮肤，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物需按危险化学品规范处置。