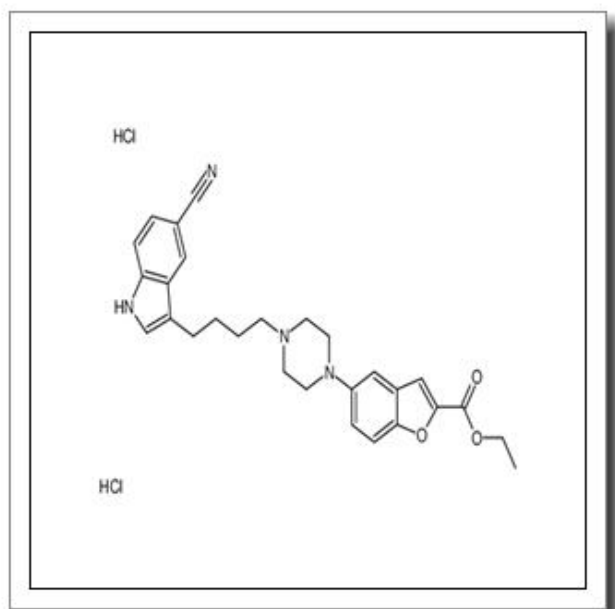


5-[4-[4-(5-氰基-1H-吡啶-3-基)丁基]-1-哌嗪基]-2-苯并呋喃羧酸乙酯盐酸盐

Ethyl 5-{4-[4-(5-cyano-1H-indol-3-yl)butyl]-1-piperazinyl}-1-benzofuran-2-carboxylate dihydrochloride



产品基本信息

属性	值
化学名称	Ethyl 5-{4-[4-(5-cyano-1H-indol-3-yl)butyl]-1-piperazinyl}-1-benzofuran-2-carboxylate dihydrochloride
中文名称	5-[4-[4-(5-氰基-1H-吡啶-3-基)丁基]-1-哌嗪基]-2-苯并呋喃羧酸乙酯盐酸盐
CAS 号	163521-09-3
分子式	C ₂₈ H ₃₂ C ₁₂ N ₄ O ₃
分子量	543.485
纯度	≥96%

产品说明

5-[4-[4-(5-氰基-1H-吲哚-3-基)丁基]-1-哌嗪基]-2-苯并呋喃羧酸乙酯盐酸盐产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 Ethyl 5-{4-[4-(5-cyano-1H-indol-3-yl)butyl]-1-piperazinyl}-1-benzofuran-2-carboxylate dihydrochloride, CAS 号 163521-09-3, 分子式 C₂₈H₃₂Cl₂N₄O₃, 分子量 543.485。其结构中包含吲哚环、哌嗪基团及苯并呋喃羧酸乙酯片段，纯度≥96% (HPLC)，易溶于 DMSO、甲醇等有机溶剂，水溶性较差。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物是一种具有多重生物活性的杂环衍生物，其分子中的氰基吲哚结构可选择性结合 5-HT 受体亚型，哌嗪基团增强脂溶性及细胞膜穿透能力。作为神经递质调节剂的中间体，在血清素能系统研究中表现出调控神经元兴奋性的潜力，对神经退行性疾病药物开发具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

主要用于以下领域：

- 神经药理学研究：作为 5-HT 受体配体的关键合成前体
- 药物开发：用于抗抑郁、抗焦虑类候选药物的结构优化
- 生化检测：标记神经细胞活性研究的荧光探针修饰组分
- 学术研究：吲哚类生物碱构效关系研究的参照标准品

4. 储存条件与使用建议

长期储存需置于-20℃干燥避光环境，短期使用可保存于 2-8℃干燥器内。建议开封后充氮密封，避免反复冻融。工作液需现配现用，溶剂推荐使用色谱级 DMSO 配制母液（10mM 浓度），后续用缓冲液稀释至实验浓度。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC、NMR 及质谱三重验证，批次间纯度差异<1%。操作时需佩戴防护手

套及护目镜, MSDS 显示其急性毒性类别为 4 级 ($LD_{50} > 2000 \text{mg/kg}$)。废弃物处理应遵守有机卤化物处置规范, 避免与强氧化剂接触。

注: 本说明仅限专业研究人员参考, 非医用或食用用途。具体实验方案需根据实际研究目的设计。