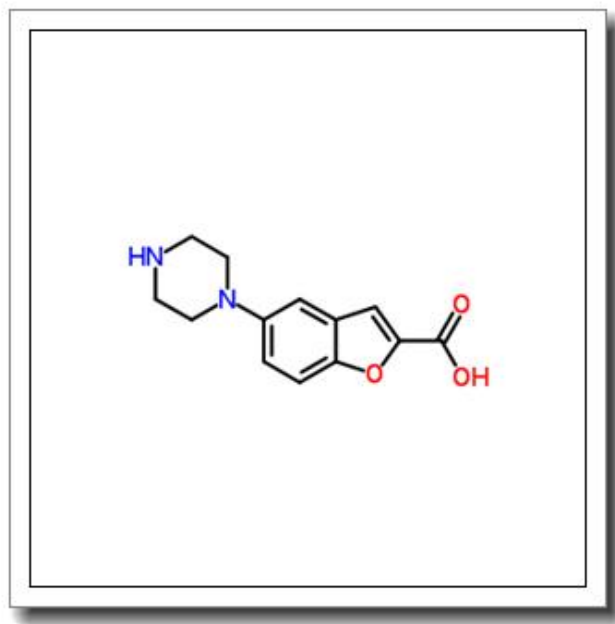


5-(哌嗪-1-基)苯并呋喃-2-羧酸

5-piperazin-1-yl-1-benzofuran-2-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	5-piperazin-1-yl-1-benzofuran-2-carboxylic acid
中文名称	5-(哌嗪-1-基)苯并呋喃-2-羧酸
CAS 号	183288-47-3
分子式	C ₁₃ H ₁₄ N ₂ O ₃
分子量	246.262
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

5-(哌嗪-1-基)苯并呋喃-2-羧酸 (CAS 号: 183288-47-3) 是一种有机化合物, 分子式为 $C_{13}H_{14}N_2O_3$, 分子量为 246.262。该化合物由苯并呋喃骨架与哌嗪基团和羧酸基团构成, 呈现白色至类白色结晶粉末状, 纯度不低于 96%。其结构中哌嗪基团的引入增强了分子的极性和水溶性, 而羧酸基团则为后续衍生化反应提供了活性位点。该化合物在常温下稳定, 但需避免强酸、强碱或氧化剂环境。

2. 生物化学功能与重要性

作为含氮杂环衍生物, 5-(哌嗪-1-基)苯并呋喃-2-羧酸在药物化学中具有重要价值。哌嗪基团常作为药效团参与受体结合, 而苯并呋喃骨架则常见于具有生物活性的分子设计中。该化合物可作为中间体用于合成抗菌、抗肿瘤或中枢神经系统药物, 尤其在激酶抑制剂和 G 蛋白偶联受体调节剂的开发中潜力显著。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要应用于医药研发和有机合成领域。具体用途包括: 作为关键中间体用于合成小分子靶向药物; 在结构-活性关系 (SAR) 研究中用于优化先导化合物; 作为配体或片段参与组合化学库构建。此外, 其羧酸基团可通过酯化、酰胺化等反应进一步衍生化, 扩展应用场景。

4. 储存条件与使用建议

建议在 2-8°C、干燥避光条件下密封保存, 长期储存需充惰性气体保护。使用前需恢复至室温并避免吸湿。操作时应在通风橱中进行, 佩戴防护手套和护目镜。溶解性测试表明, 该化合物易溶于二甲基亚砜 (DMSO), 微溶于甲醇, 难溶于水, 建议根据实验需求选择合适的溶剂体系。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 并提供质谱和核磁共振谱图验证结构。安全数据表明, 该化合物可能对眼睛和皮肤有刺激性, 操作时应避免直接接触。如不慎接

触，需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应作为有害化学品处理，遵守当地环保法规。运输时需分类为非危险品，但建议避免与食品混装。