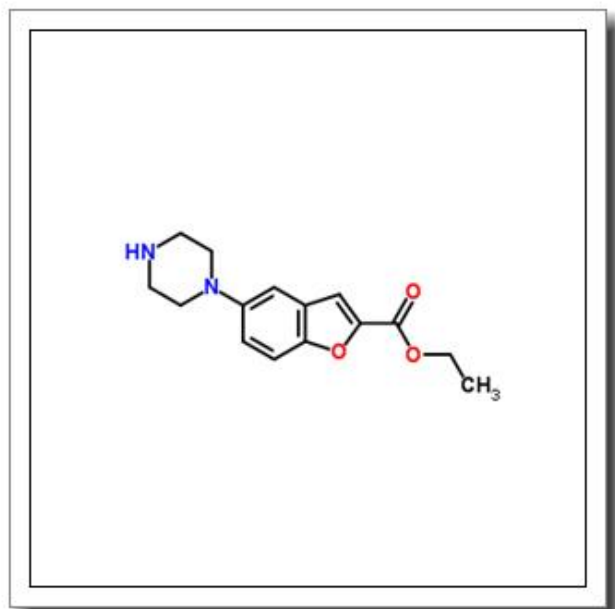


维拉佐酮中间体 5-(哌嗪-1-基)苯并呋喃-2-甲酸乙酯

Ethyl 5-(piperazin-1-yl)benzofuran-2-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Ethyl 5-(piperazin-1-yl)benzofuran-2-carboxylate
中文名称	维拉佐酮中间体 5-(哌嗪-1-基)苯并呋喃-2-甲酸乙酯
CAS 号	163521-20-8
分子式	C ₁₅ H ₁₈ N ₂ O ₃
分子量	274.315
纯度	≥96%

产品说明

5-(哌嗪-1-基)苯并呋喃-2-甲酸乙酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 Ethyl 5-(piperazin-1-yl)benzofuran-2-carboxylate, 中文名称为 5-(哌嗪-1-基)苯并呋喃-2-甲酸乙酯, CAS 号为 163521-20-8, 是一种重要的医药中间体。其分子式为 C₁₅H₁₈N₂O₃, 分子量为 274.315, 纯度标准为 ≥96%。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 具有苯并呋喃与哌嗪的复合结构, 表现出良好的脂溶性和稳定性, 在有机溶剂如甲醇、乙醇及二甲基亚砷中易溶。

2. 生物化学功能与重要性

作为维拉佐酮 (Vilazodone) 的关键合成中间体, 本产品通过哌嗪基团的活性位点参与 5-羟色胺再摄取抑制剂的构效关系构建。其苯并呋喃骨架可增强分子与靶标受体的结合能力, 在神经递质调节类药物研发中具有不可替代的作用。

3. 主要应用领域与具体用途

该化合物主要用于抗抑郁药物维拉佐酮的工业化生产, 同时可作为以下领域的科研试剂:

- 中枢神经系统药物先导化合物的结构修饰
- 5-HT_{1A} 受体激动剂的构效关系研究
- 杂环化合物库的构建与筛选

4. 储存条件与使用建议

建议在 2-8°C 的干燥避光环境中密封保存, 长期储存需充入惰性气体保护。使用时应注意:

- 溶解前需恢复至室温以避免结露
- 推荐使用无水级有机溶剂配制母液
- 实验操作应在通风橱中进行

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 ≥96%, 重金属含量符合 USP 标准。安全数据如下:

- GHS 分类: 刺激性物质 (类别 2)
- 防护措施: 佩戴护目镜及防尘口罩
- 应急处理: 皮肤接触时立即用肥皂水冲洗
- 运输编码: UN2811 (6.1 类危险品)

注: 本说明仅限专业研究人员参考, 具体应用需结合实验方案调整。更多技术参数请索取 COA 报告。