

如果您觉得本站对您的学习工作有帮助，请与您的朋友一起分享：) [爱化学www.chemistry.cn](#)

CAS Number:139755-83-2 基本信息

中文名:	西地那非; 1-[4-乙氧基-3-[5-(6,7-二氢-1-甲基-7-氧代-3-丙基-1H-吡唑并[4,3d]嘧啶)]苯磺酰]-4-甲基哌嗪
英文名:	Sildenafil
别名:	5-[2-Ethoxy-5-(4-methylpiperazin-1-yl-sulphonyl)phenyl]-1-methyl-3-n-propyl-1,6-dihydro-7H-pyrazol[4,3d]pyrimidin-7-one
分子结构:	
分子式:	C ₂₂ H ₃₀ N ₆ O ₄ S
分子量:	474.58
CAS登录号:	139755-83-2

物理化学性质

性质描述:	西地那非(139755-83-2)的化学性质： 从 <u>甲醇</u> -二甲基甲酰胺结晶，熔点187~189℃。 <u>柠檬酸</u> 西地那非: C ₂₂ H ₃₀ N ₆ O ₄ S·C ₆ H ₈ O ₇ 。
-------	---

CAS#139755-83-2化学试剂供应商(点击生产商链接可查看价格)

江苏贝达医药科技有限公司 专业从事139755-83-2及其他化工产品的生产销售 0512-63008636

供应商信息已更新且供应商的链接失效，请登录爱化学 [CAS No. 139755-83-2 查看](#)若您是此化学品供应商，请按照[化工产品收录](#)说明进行免费添加

其他信息

产品应用:	西地那非(139755-83-2)的用途： 为V-磷酸二酯酶抑制剂，用于治疗勃起机能障碍。
	西地那非(139755-83-2)的生产方法： 3-正丙基吡唑-5-羧酸乙酯和 <u>硫酸二甲酯</u> (16.8g, 0.133mol)混合，在90℃加热2h。将反应液溶于 <u>二氯甲烷</u> ，用 <u>碳酸钠</u> 溶液洗。分出有机层，用 <u>无水硫酸镁</u> 干燥。减压浓缩，剩余的固体用300g <u>硅胶</u> 层析，以 <u>二氯甲烷</u> 洗脱，得24g无色的油状物的1-甲基-3-正丙基吡唑-5-羧酸乙酯(II)，收率79%。Rf 0.8(硅胶； <u>二氯甲烷</u> : <u>甲醇</u> : <u>乙酸</u> =80: 20: 1)。 化合物(II)(20.2g, 0.10mol)悬浮于6mol/L的 <u>氢氧化钠</u> 溶液(50ml, 0.30mol)中，在80℃加热反应2h。加50ml水稀释，以25ml浓 <u>盐酸</u> 酸化。过滤得到12.3g淡棕色结晶的1-甲基-3-正丙基吡唑-5-羧酸(III)，收率71%，熔点150~154℃。 将化合物(III)(12.1g, 0.072mol)分批加到13ml发烟 <u>硫酸</u> 和11ml发烟 <u>硝酸</u> 的混合液中，保持温度在60℃以下。加毕，在60℃反应过夜。冷却至室温，倾入冰中。滤集沉淀，得11.5g白色的固体的1-甲基-4-硝基-3-正丙基吡唑-5-羧酸(IV)，收率75%，熔点124~127℃。 将化合物(IV)(11.3g, 0.053mol)加到50ml氯化亚砜中，回流3h。冷却，减压蒸出过剩的氯化亚砜。将油状的剩余

物溶于50ml丙酮，然后将此丙酮溶液小心地加到50g冰和50ml浓氨水的混合液中。滤集沉淀，得8.77g淡黄色固体的1-甲基-4-硝基-3-正丙基吡唑-5-羧酰胺(V)，收率78%。

将化合物(V)(3.45g, 16.2mmol)和二氯化锡二水合物(18.4g, 81mmol)悬浮于乙醇中，回流2h。冷至室温，用2mol/L氢氧化钠溶液调至Ph值9。用二氯甲烷(3×150ml)萃取，萃取液合并，无水硫酸镁干燥。减压浓缩，剩余物用乙醚研磨，得2.77g类白色固体的4-氨基-1-甲基-3-正丙基吡唑-5-羧酰胺(VI)，收率94%，熔点98~101℃。

将化合物(VI)(3.0g, 16.4mmol)、4-二甲氨基吡啶(0.02g, 0.164mmol)和三乙胺(3.34g, 33.0mmol)溶于50ml二氯甲烷，在0℃和搅拌下，再加入溶于50ml二氯甲烷的2-乙氧基苯甲酰氯(6.1g, 33.0mmol)的溶液。任其升至室温，搅拌2h。减压蒸出溶剂，剩余物溶于250ml 19:1的二氯甲烷-甲醇混合溶剂中。用100ml 1mol/L盐酸洗，无水硫酸镁干燥。减压浓缩，粗品用200g硅胶层析，以97:3的二氯甲烷-甲醇洗脱，得到粉红色固体。用乙酸乙酯-己烷结晶，得2.2g淡粉红色固体的4-(2-乙氧基苯甲酰氨基)-1-甲基-3-正丙基吡唑-5-羧酰胺(VII)，收率40%，熔点153~155℃。

氢氧化钠(54g, 1.35mol)和224ml 30%双氧水溶于2000ml水，分批加入化合物(VII)(233g, 0.676mol)，再加入700ml乙醇，回流2h。冷却，减压浓缩。在冷却下，往剩余的固体中加入380ml 2mol/L盐酸，然后用二氯甲烷(1×700ml, 3×200ml)萃取。萃取液合并，先后用碳酸钠溶液(3×400ml)和300ml盐水洗，无水硫酸钠干燥。减压浓缩，剩余物用1000g硅胶层析，用逐渐含0%到含1%的甲醇的二氯甲烷溶液洗脱。粗品用300ml乙醚研磨，得152.2g无色固体的5-(2-乙氧基苯基)-1-甲基-3-正丙基-1, 6-二氢-7H-吡唑并[4, 3-d]吡啶-7-酮(VIII)，收率72%，熔点143~146℃。

在0℃和氮气保护下，将化合物(VIII)(10.0g, 32.1mmol)分批加到20ml氯磺酸中，搅拌过夜。小心倾入150ml冰水中，用9:1的二氯甲烷-甲醇混合溶剂(4×100ml)萃取。萃取液合并，无水硫酸钠干燥。减压浓缩，得12.8g白色固体的5-(5-氯磺基-2-乙氧基苯基)-1-甲基-3-正丙基-1, 6-二氢-7H-吡唑并[4, 3-d]吡啶-7-酮(IX)，收率97%，熔点179~181℃。

将化合物(IX)(750mg, 1.80mmol)悬浮于50ml乙醇，在室温和搅拌下，加入4-甲基哌嗪(5.50mmol)，搅拌4天。减压蒸出溶剂，剩余物溶于100ml 19:1的二氯甲烷-甲醇混合溶剂，用100ml饱和碳酸钠溶液洗。水层再用二氯甲烷-甲醇(3×100ml)萃取。所有有机层合并，无水硫酸镁干燥。减压浓缩，剩余物用甲醇-二甲基甲酰胺结晶，得西地那非，收率88%，熔点187~189℃。

在叔丁醇钾存在下，化合物(X)在丁醇中回流8h，得到西地那非，收率90.2%。

西地那非(139755-83-2)的药理作用：

生产方法及其他：

西地那非(Sildenafil)，又译昔多芬，是一种研发治疗心血管疾病药物时意外发明出的治疗男性勃起功能障碍药物，一般以其商业用名Viagra(中国大陆注册名万艾可，台湾和香港注册名威而钢)广为人知。不过相对于商品名西地那非在中国的俗名“伟哥”使用的更广泛，影响也更大。由于辉瑞公司对西地那非享有专利权，因此该公司以西地那非的枸橼酸盐(柠檬酸盐)所制造的万艾可，是目前市面上唯一合法以西地那非作为主要成分的药物。

西地那非(139755-83-2)的用法用量：

对大多数患者，推荐剂量为50mg，在性活动前约1小时服用；但在性活动前0.5~4小时内的任何时候服用均可。基于药效和耐受性，剂量可增加至100毫克(最大推荐剂量)或降低至25毫克。每日最多服用1次。

下列因素与血浆西地那非水平(AUC)增加有关：年龄65岁以上(增加40%)、肝脏受损(如肝硬化，增加80%)、重度肾损害(肌酐清除率<30ml/分，增加100%)、同时服用强效细胞色素P450 3A4抑制剂(酮康唑、伊曲康唑增加200%)、红霉素增加182%、saquinavir增加210%。由于血浆水平较高可能同时增加药效和不良事件发生率，故这些患者的初始剂量以25mg为宜。

西地那非(139755-83-2)的不良反应：

头痛、潮红、消化不良、鼻塞及视觉异常等。视觉异常为轻度和一过性的，主要表现为视物色淡、光感增强或视物模糊。

西地那非(139755-83-2)的禁忌症:

服用任何剂型硝酸酯类药物的患者，无论是规律或间断服用，均为禁忌症。对西地那非(万艾可)中任何成分过敏的患者禁用。

西地那非(139755-83-2)的注意事项:

西地那非-硝酸酯类影响血压的相互作用，可从给药开始持续到整个6小时的观察期内。所以，在任何情况下，联合给予西地那非和有机硝酸酯类或提供NO类药物(如硝普钠)均属禁忌。

以下患者慎用西地那非：阴茎解剖畸形(如阴茎偏曲、海绵体纤维化、Peyronie氏病)，易引起阴茎异常勃起的疾病(如镰状细胞性贫血、多发性骨髓瘤、白血病)。其他治疗勃起功能障碍的方法与本品合用的安全性和有效性尚未研究，不推荐联合使用。在已有心血管危险因素存在时，用药后性活动有发生非致命性/致命性心脏事件的危险。在性活动开始时如出现心绞痛、头晕、恶心等症状，须终止性活动。国外批准本品上市后，有少量勃起时间延长(超过4小时)和异常勃起(痛性勃起超过6小时)的报告。如持续勃起超过4小时，患者应立即就诊。如异常勃起未得到即刻处理，阴茎组织将可能受到损害并可能导致永久性勃起功能丧失。西地那非对性传播疾病无保护作用。

其他药物对西地那非的作用:

体外实验：本品代谢主要通过细胞色素P450 3A4(主要途径)和2C9(次要途径)，故这些同功酶的抑制剂会降低西地那非的清除。

体内实验：健康志愿者同时服用本品50mg和西咪替丁(一种非特异性细胞色素 P450抑制剂)800mg，导致血浆内西地那非浓度增高56%。

单剂西地那非100mg与细胞色素P450 3A4的特异性抑制剂红霉素(500mg，一日两次，共5天达到稳态)合用时，西地那非的药时曲线下面积(AUC)升高182%；单剂西地那非100mg与另一种CYP450 3A4抑制剂HIV蛋白酶抑制剂saquinavir合用，达到稳态时(1200mg，一日三次)，则后者的Cmax提高140%，AUC增加210%，西地那非不影响后者的药代动力学；酮康唑、伊曲康唑等更强效的CYP450 3A4抑制剂，上述作用可能更大；当与CYP450 3A4抑制剂(如酮康唑、红霉素、西咪替丁)合用时，西地那非的清除率降低。可预测同时服用CYP450 3A4的诱导剂(如利福平)将降低血浆西地那非水平。

西地那非(139755-83-2)的药物过量:

当发生药物过量时，应根据需要采取常规支持疗法。因西地那非与血浆蛋白结合率高，故肾脏透析不会增加清除率。

相关化学品信息

[2-\(2-硝基苯胺基\)-3-氨基-5-甲基噻吩](#) [乙酰丙酮酸铜](#) [5-氨基-4-羟基-3-\[\(2-羟基-5-硝基苯基\)偶氮\]-2,7-萘二磺酸](#) [亚硫酸氢钠甲萘醌](#) [氯化钇](#) [N-萘-1-基-3-羟基萘-2-甲酰胺](#) [2-\[乙基\[4-\[\(6-甲氧基-2-苯并噻唑基\)偶氮\]苯基\]氨基\]乙醇](#) [\(R\)-\(+\)-2-氨基-2'-羟基-1,1'-联萘](#) [氯碘羟喹](#) [N,N'-亚甲基二脲](#) [3-吲哚丁酸](#) [氯乙酸异辛酯](#) [134966-01-1](#) [136779-28-7](#) [13504-72-8](#) [五氧化三钛](#) [联吡啶](#) [镁](#)