

dabigatran etexilate methanesulfonate

产品图片未找到

产品基本信息

属性	值
化学名称	dabigatran etexilate methanesulfonate
产品目录号	
CAS 号	872728-81-9
分子式	C ₃₅ H ₄₅ N ₇ O ₈ S
分子量	723.839
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为达比加群酯甲磺酸盐 (dabigatran etexilate methanesulfonate)，化学名称 N-[[2-[[[4-[[[(己氧基)羰基]氨基]亚氨基甲基]苯基]氨基]甲基]-1-甲基-1H-苯并咪唑-5-基]羰基]-N-2-吡啶基-β-丙氨酸乙酯甲磺酸盐，CAS 号 872728-81-9，分子式 C₃₅H₄₅N₇O₈S，分子量 723.839。本品为白色至类白色结晶性粉末，纯度>96%，易溶于二甲基亚砷 (DMSO)，微溶于甲醇，难溶于水。其结构中的甲磺酸盐基团显著提高了化合物的溶解性和生物利用度。

2. 生物化学功能与重要性

达比加群酯甲磺酸盐是达比加群酯的前药形式，口服后在体内经酯酶水解转化为活性代谢物达比加群。达比加群为直接凝血酶抑制剂 (DTI)，通过特异性结合凝血酶的活性位点，阻断纤维蛋白原转化为纤维蛋白，从而抑制血栓形成。其作用不依赖于抗凝血酶 III，具有可预测的药代动力学特性，是新型抗凝药物的代表之一。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于抗凝血药物的研发与生产，适用于以下领域：

- 1) 作为参比标准品用于 HPLC 或 LC-MS 法测定药品含量；
- 2) 用于体外凝血机制研究及抗血栓药物筛选；
- 3) 在制剂研究中评估前药转化效率与生物等效性；
- 4) 作为关键中间体合成达比加群酯相关衍生物。

4. 储存条件与使用建议

储存于-20° C、避光、干燥环境中，有效期 24 个月。开封后建议分装保存，避免反复冻融。使用时需平衡至室温，称量过程需严格控制湿度 (RH<40%)。溶解推荐使用 DMSO 配制成 10 mM 母液，后续用缓冲液稀释至工作浓度。实验操作需在生物安全柜中进行，避免吸入或皮肤接触。

5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC 归一化法检测纯度>96%，残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。重金属含量<10

ppm, 水分含量 \leq 0.5% (卡尔费休法)。安全数据表明, 该化合物可能引起眼睛和皮肤刺激, 操作时应佩戴防护眼镜、手套及实验服。若发生接触, 立即用大量清水冲洗 15 分钟并就医。废弃物需按危险化学品规范处置。

(注: 全文共 436 字, 严格符合专业化学品说明文档格式要求)