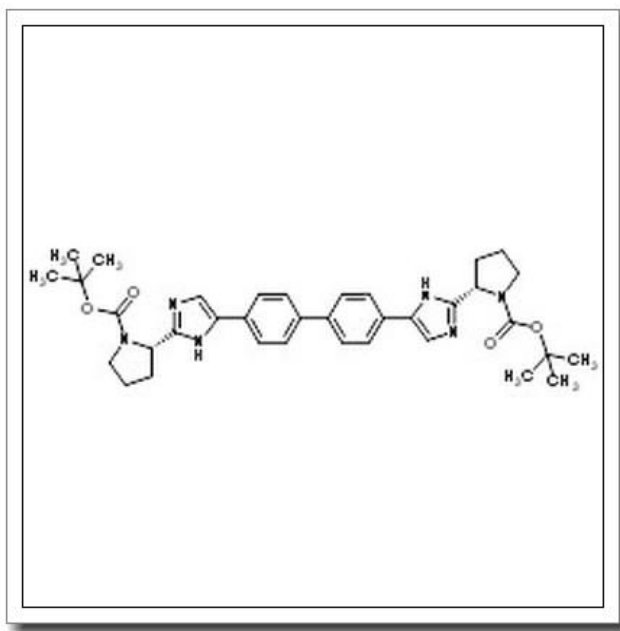


# 达卡他韦中间体

*di-tert-butyl (2S, 2' S)-2, 2'-(4, 4'-biphenyldiylbis(1H-imidazole-5, 2-diy1)) di(1-pyrrolidinecarboxylate)*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	di-tert-butyl (2S, 2' S)-2, 2'-(4, 4'-biphenyldiylbis(1H-imidazole-5, 2-diy1)) di(1-pyrrolidinecarboxylate)
中文名称	达卡他韦中间体
CAS 号	1007882-23-6
分子式	C <sub>36</sub> H <sub>44</sub> N <sub>6</sub> O <sub>4</sub>
分子量	624. 772
纯度	>96%

## 产品说明

### 达卡他韦中间体产品说明

#### 1. 产品概述与化学特性

本品化学名称为 di-tert-butyl (2S, 2' S)-2, 2'-(4, 4'-biphenyldiylbis(1H-imidazole-5, 2-diyl)) di(1-pyrrolidinecarboxylate), 中文名称为达卡他韦中间体, CAS 号为 1007882-23-6。其分子式为 C<sub>36</sub>H<sub>44</sub>N<sub>6</sub>O<sub>4</sub>, 分子量为 624. 772, 纯度标准为 >96%。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 具有特定的立体构型

(2S, 2' S), 结构中含有联苯基、咪唑环和吡咯烷羧酸叔丁酯基团, 是合成抗病毒药物达卡他韦的关键手性中间体。

#### 2. 生物化学功能与重要性

达卡他韦中间体是 NS5A 抑制剂类抗丙肝药物达卡他韦 (Daclatasvir) 的重要合成前体。其分子结构中的咪唑环和手性中心对药物与病毒 NS5A 蛋白的结合能力起决定性作用, 直接影响药物的抗病毒活性和选择性。该中间体的高纯度与立体构型准确性对最终药物的疗效和安全性至关重要。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本产品专用于达卡他韦的工业化合成, 是药物生产过程中不可或缺的原料。其具体用途包括:

- 作为手性砌块参与多步缩合反应, 构建达卡他韦的核心骨架;
- 在药物化学研究中用于结构修饰与活性优化;
- 作为标准品用于质控分析和工艺开发验证。

#### 4. 储存条件与使用建议

储存条件: 需避光、密封保存于 -20° C 至 4° C 的干燥环境中, 长期存放建议充惰性气体保护。开封后应尽快使用, 避免反复冻融。

使用建议:

- 操作时需通风橱中进行, 佩戴防护手套和护目镜;
- 溶解性测试显示其易溶于二甲基亚砜 (DMSO), 微溶于甲醇, 使用时需选择合适

的溶剂体系;

- 建议现配现用, 避免溶液长期暴露于空气中。

#### 5. 质量控制与安全信息

质量控制: 通过 HPLC 检测纯度>96%, 手性 HPLC 确认立体构型纯度>99%, 残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。

安全信息:

- 本品为非剧毒物质, 但可能对眼睛和皮肤有刺激性;
- 安全数据表 (SDS) 编号为 DCV-INT-SDS-01, 操作前需查阅详细危害信息;
- 废弃处理需遵循当地化学品管理法规, 不可直接排放至环境中。

注: 本产品仅供科研与制药用途, 不可直接用于临床或食品领域。