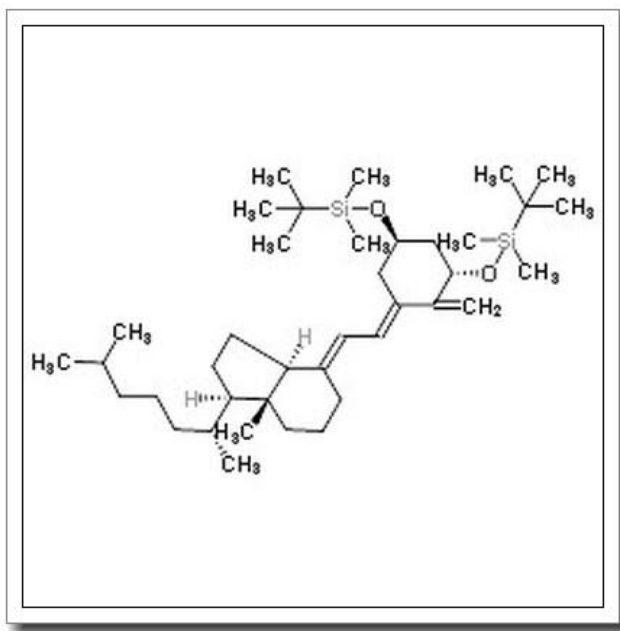


阿尔法骨化醇中间体

[[(1a, 3b, 5E, 7E)-9, 10-Secocholesta-5, 7, 10(19)-triene-1, 3-diy1]bis (oxy)]bis[(1, 1-dimethylethyl)dimethylsilane]



产品基本信息

属性	值
化学名称	<i>[[(1a, 3b, 5E, 7E)-9, 10-Secocholesta-5, 7, 10(19)-triene-1, 3-diy1]bis (oxy)]bis[(1, 1-dimethylethyl)dimethylsilane]</i>
中文名称	阿尔法骨化醇中间体
CAS 号	112670-85-6
分子式	C ₃₉ H ₇₂ O ₂ Si ₂
分子量	629. 159
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为[(1a, 3b, 5E, 7E)-9, 10-Secocholesta-5, 7, 10(19)-triene-1, 3-diyl]bis(oxy)]bis[(1, 1-dimethylethyl)dimethylsilane], 中文名称为阿尔法骨化醇中间体, CAS 号 112670-85-6, 分子式 C₃₉H₇₂O₂Si₂, 分子量 629.159。该化合物是一种高纯度 (>96%) 的有机硅衍生物, 具有特定的立体构型

(1a, 3b, 5E, 7E), 其结构特征为骨化醇类化合物合成中的关键中间体。化学性质稳定, 需避光保存, 易溶于非极性有机溶剂如二氯甲烷、乙醚等。

2. 生物化学功能与重要性

该中间体是合成阿尔法骨化醇 (1 α -羟基维生素 D₃) 的重要前体, 后者为活性维生素 D₃ 类似物, 在调节钙磷代谢、促进骨骼健康及免疫调节中发挥核心作用。其分子结构中的硅保护基团 (TBS) 可选择性脱除, 为后续羟基化反应提供高区域选择性, 是维生素 D 类药物工业化生产的关键原料。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于制药领域, 特别是维生素 D 类似物的合成工艺。具体用途包括:

1. 作为阿尔法骨化醇原料药生产的核心中间体
2. 用于研发新型维生素 D 受体调节剂
3. 在骨质疏松症、肾性骨营养不良等药物开发中作为关键砌块
4. 实验室级用于研究维生素 D 代谢通路及结构-活性关系

4. 储存条件与使用建议

储存于-20° C 至-10° C 的惰性气体 (如氩气) 环境中, 严格避光、防潮。开封后建议分装使用, 避免反复冻融。溶解时优先选用干燥的惰性溶剂 (如无水 THF), 反应体系需严格除氧。操作应在氮气保护下进行, 使用前需恢复至室温并充分氮气吹扫。

5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC 检测纯度>96%, 残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。安全数据:

1. 避免吸入或皮肤接触，操作时需佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩
2. 如遇泄漏，用惰性吸附材料处理，不得使用水冲洗
3. 废弃物应作为有机硅化合物危险废物处置
4. 急救措施：眼部接触立即用生理盐水冲洗 15 分钟，皮肤接触用肥皂水彻底清洗
5. 运输分类：UN3077，9 类危险品，需贴注“对环境有害”标识