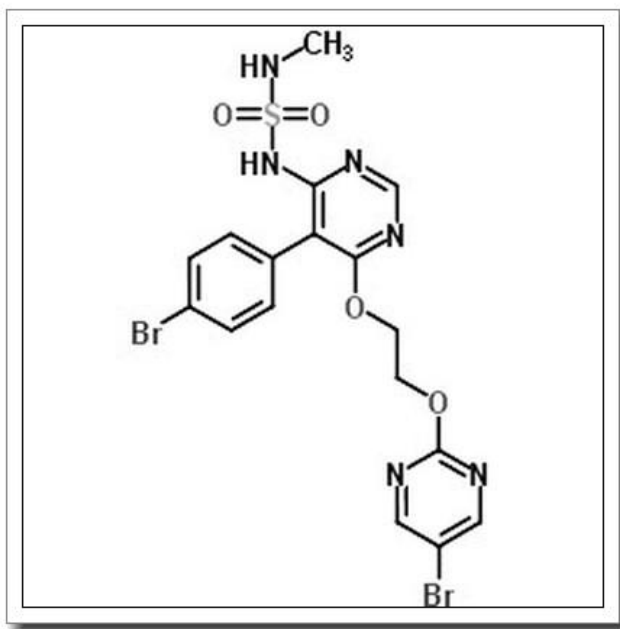


## 马西替坦原料药杂质 B

*N*-[5-(4-Bromophenyl)-6-{2-[(5-bromo-2-pyrimidinyl)oxy]ethoxy}-4-pyrimidinyl]-*N'*-methylsulfuric diamide



### 产品基本信息

属性	值
化学名称	<i>N</i> -[5-(4-Bromophenyl)-6-{2-[(5-bromo-2-pyrimidinyl)oxy]ethoxy}-4-pyrimidinyl]- <i>N'</i> -methylsulfuric diamide
中文名称	马西替坦原料药杂质 B
CAS 号	441798-25-0
分子式	C <sub>17</sub> H <sub>16</sub> Br <sub>2</sub> N <sub>6</sub> O <sub>4</sub> S
分子量	560.22
纯度	>96%

## 产品说明

### 1. 产品概述与化学特性

马西替坦原料药杂质 B (化学名称: N-[5-(4-溴苯基)-6-{2-[(5-溴-2-嘧啶基)氧]乙氧基}-4-嘧啶基]-N'-甲基硫酸二酰胺) 是一种有机溴化合物, CAS 号为 441798-25-0, 分子式为 C<sub>17</sub>H<sub>16</sub>Br<sub>2</sub>N<sub>6</sub>O<sub>4</sub>S, 分子量为 560.22。该化合物为马西替坦

(Macitentan) 原料药合成过程中产生的杂质, 纯度高于 96%, 通常以白色至类白色固体形式存在。其结构中含有嘧啶环和溴代苯基团, 具有较高的化学稳定性和特定的极性特征。

### 2. 生物化学功能与重要性

马西替坦原料药杂质 B 作为马西替坦的合成中间体或降解产物, 在药物质量控制中具有重要意义。其存在可能影响马西替坦的疗效和安全性, 因此需严格控制其含量。该杂质的检测和分析有助于优化药物生产工艺, 确保原料药和制剂符合药典标准, 为药物研发和质量控制提供关键参考。

### 3. 主要应用领域与具体用途

该杂质主要用于药物研发和质量控制领域, 具体用途包括: 作为马西替坦原料药和制剂的质量标准物质, 用于高效液相色谱 (HPLC) 或质谱 (MS) 分析中的对照品; 作为工艺优化研究的参考物质, 帮助识别和减少合成过程中的副产物; 此外, 还可用于稳定性研究和降解途径分析。

### 4. 储存条件与使用建议

建议将本品置于干燥、避光的环境中, 储存温度为 2-8°C, 长期保存需充氮密封。使用前需恢复至室温并避免反复冻融。操作时应穿戴防护装备 (如手套、护目镜), 在通风良好的环境下进行, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解时需选择合适的溶剂 (如甲醇、乙腈), 并确保完全溶解后再用于分析。

### 5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和核磁共振 (NMR) 验证, 纯度 >96%。使用时应严格遵循实验室安全规范, 避免与强氧化剂接触。其安全数据表 (SDS) 显示, 该化合物可能对眼

睛、皮肤和呼吸系统有刺激性，若不慎接触，需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应按照危险化学品处理规范处置。