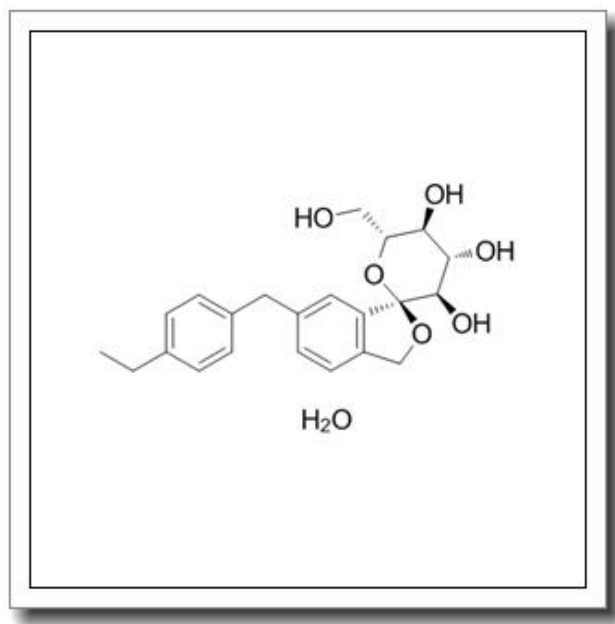


托格列净

(3S, 3'R, 4'S, 5'S, 6'R)-5-[(4-ethylphenyl)methyl]-6'-(hydroxymethyl)spiro[1H-2-benzofuran-3, 2'-oxane]-3', 4', 5'-triol, hydrate



产品基本信息

属性	值
化学名称	<i>(3S, 3'R, 4'S, 5'S, 6'R)-5-[(4-ethylphenyl)methyl]-6'-(hydroxymethyl)spiro[1H-2-benzofuran-3, 2'-oxane]-3', 4', 5'-triol, hydrate</i>
中文名称	托格列净
CAS 号	1201913-82-7
分子式	C ₂₂ H ₂₈ O ₇
分子量	404.454
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为托格列净 ((3S, 3' R, 4' S, 5' S, 6' R)-5-[(4-ethylphenyl)methyl]-6'-(hydroxymethyl)spiro[1H-2-benzofuran-3, 2'-oxane]-3', 4', 5'-triol, hydrate), 化学式 C₂₂H₂₈O₇, 分子量 404.454, CAS 号 1201913-82-7。其纯度 ≥96%, 以白色至类白色结晶粉末形式存在, 易溶于有机溶剂如 DMSO 和甲醇, 微溶于水。结构中的螺环苯并呋喃骨架和多元醇基团赋予其独特的立体化学特性, 需注意其光学活性对生物活性的影响。

2. 生物化学功能与重要性

托格列净是一种高选择性 SGLT2 (钠-葡萄糖协同转运蛋白 2) 抑制剂, 通过抑制肾脏近端小管对葡萄糖的重吸收, 促进尿糖排泄, 从而降低血糖水平。其作用机制独立于胰岛素, 适用于 2 型糖尿病治疗研究。该分子在 C-3'、C-4' 和 C-5' 位的羟基修饰对其靶标结合亲和力至关重要。

3. 主要应用领域与具体用途

作为抗糖尿病药物研发的关键中间体, 托格列净主要用于以下领域:

- (1) 药物开发: 用于 SGLT2 抑制剂类降糖药的合成与活性研究;
- (2) 药理实验: 评估肾脏葡萄糖代谢调控机制;
- (3) 对照品: 作为 HPLC 或 LC-MS 分析的参考标准物质。

4. 储存条件与使用建议

储存于 -20° C 避光干燥环境中, 长期保存建议充氮密封。开封后需在干燥器内保存, 避免吸湿。使用时需平衡至室温, 称量过程需快速以减少空气暴露。建议在惰性气体保护下进行溶解操作, 溶剂选择需匹配后续实验体系 (如细胞实验需使用无内毒素级溶剂)。

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。MS 和 NMR 谱图已验证结构一致性。安全数据: 急性毒性 (LD₅₀ 大鼠口服) >2000 mg/kg, 但操

作时仍需佩戴防护手套及护目镜。若接触皮肤，立即用大量清水冲洗。废弃物处理需符合当地危险化学品法规。

（注：实际应用前请查阅最新版物质安全数据表 MSDS 及文献数据，以获取更新信息。）