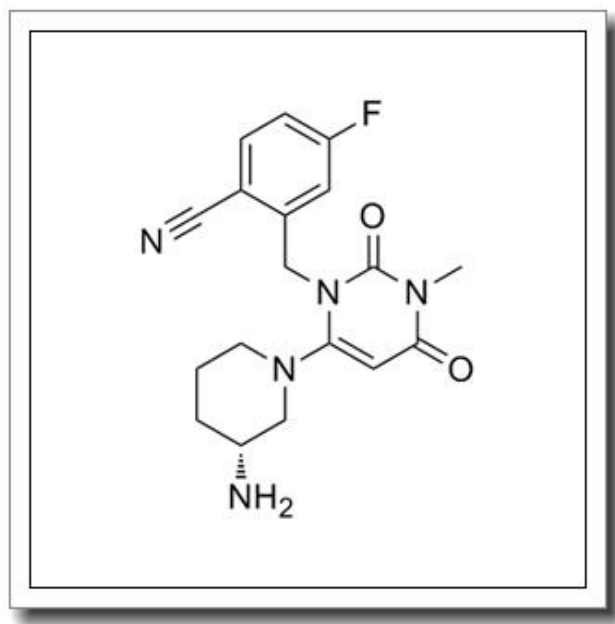


曲格列汀

2-[[6-[(3R)-3-aminopiperidin-1-yl]-3-methyl-2,4-dioxypyrimidin-1-yl]methyl]-4-fluorobenzonitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-[[6-[(3R)-3-aminopiperidin-1-yl]-3-methyl-2,4-dioxypyrimidin-1-yl]methyl]-4-fluorobenzonitrile
中文名称	曲格列汀
CAS 号	865759-25-7
分子式	C ₁₈ H ₂₀ FN ₅ O ₂
分子量	357.382
纯度	≥ 96%

产品说明

2-[[6-[(3R)-3-氨基哌啶-1-基]-3-甲基-2,4-二氧代嘧啶-1-基]甲基]-4-氟苯甲腈（曲格列汀）产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称 2-[[6-[(3R)-3-aminopiperidin-1-yl]-3-methyl-2,4-dioxypyrimidin-1-yl]methyl]-4-fluorobenzonitrile, CAS 号 865759-25-7, 分子式 C₁₈H₂₀FN₅O₂, 分子量 357.382。纯度经 HPLC 检测 ≥96%，具有明确的立体构型（R 型哌啶环）。其结构中含氟苯甲腈基团与二氧代嘧啶核心，赋予分子特定极性与氢键结合能力，25℃时溶解度数据显示易溶于 DMSO，微溶于甲醇。

2. 生物化学功能与重要性

作为高选择性二肽基肽酶-4（DPP-4）抑制剂，曲格列汀通过不可逆结合 DPP-4 活性位点，延长胰高血糖素样肽-1（GLP-1）和葡萄糖依赖性促胰岛素多肽（GIP）的半衰期，进而促进胰岛素分泌并抑制胰高血糖素释放。其独特的长效特性（血浆半衰期约 40 小时）源于 3R-氨基哌啶结构的立体选择性，在 2 型糖尿病治疗中具有显著的血糖依赖性调节优势。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于糖尿病治疗药物的研发与生产：

- （1）作为活性药物成分（API）用于口服降糖制剂
- （2）DPP-4 抑制机制研究的标准参照物
- （3）糖尿病动物模型建立的诱导剂
- （4）药物代谢动力学研究的同位素标记前体

4. 储存条件与使用建议

储存于-20℃、避光、干燥的惰性气体环境中，有效期 24 个月。开封后建议分装充氮保存。使用前需室温平衡 30 分钟，称量时避免湿度 >60% 的环境。溶解推荐使用

预冷的 DMSO (浓度 $\leq 10\text{mM}$)，工作液需现配现用。实验操作建议佩戴 N95 口罩及丁腈手套。

5. 质量控制与安全信息

批次质检包含：

- (1) HPLC 纯度检测 (保留时间 4.2 ± 0.3 分钟)
- (2) 手性 HPLC 验证 (ee 值 $> 99\%$)
- (3) 残溶检测 (甲醇 $< 0.1\%$)

安全数据：急性毒性 LD₅₀ (大鼠口服) $> 2000\text{mg/kg}$ ，皮肤刺激性类别 3。MSDS 显示其粉尘可能引起呼吸道刺激，实验应在通风橱中进行。废弃物处置需符合危险有机化合物处理规范。

注：本产品仅限科研用途，不适用于临床给药。使用者应具备有机化合物操作资质并查阅最新版文献以确认具体实验参数。