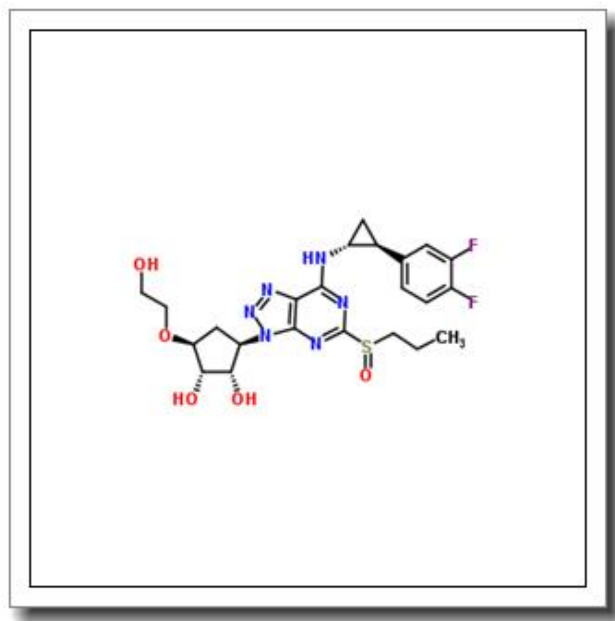


## 替格瑞洛杂质 05

(1S, 2S, 3R, 5S)-3-[7-[[ (1R, 2S)-2-(3, 4-Difluorophenyl)cyclopropyl]amino]-5-(propylsulfinyl)-3H-[1, 2, 3]triazolo[4, 5-d]pyrimidin-3-yl]-5-(2-hydroxyethoxy)-1, 2-cyclopentane-1, 2-diol



### 产品基本信息

属性	值
化学名称	(1S, 2S, 3R, 5S)-3-[7-[[ (1R, 2S)-2-(3, 4-Difluorophenyl)cyclopropyl]amino]-5-(propylsulfinyl)-3H-[1, 2, 3]triazolo[4, 5-d]pyrimidin-3-yl]-5-(2-hydroxyethoxy)-1, 2-cyclopentane-1, 2-diol
中文名称	替格瑞洛杂质 05
CAS 号	1644461-85-7
分子式	C <sub>23</sub> H <sub>28</sub> F <sub>2</sub> N <sub>6</sub> O <sub>5</sub> S
分子量	538. 567
纯度	≥96%



## 产品说明

产品名称: 替格瑞洛杂质 05

化学名称: (1S, 2S, 3R, 5S)-3-[7-{{(1R, 2S)-2-(3, 4-二氟苯基)环丙基}氨基}-5-(丙基亚磺酰基)-3H-[1, 2, 3]三唑并[4, 5-d]嘧啶-3-基]-5-(2-羟乙氧基)-1, 2-环戊二醇

CAS 号: 1644461-85-7

分子式: C<sub>23</sub>H<sub>28</sub>F<sub>2</sub>N<sub>6</sub>O<sub>5</sub>S

分子量: 538.567

纯度: ≥96%

### 1. 产品概述与化学特性

替格瑞洛杂质 05 是一种高纯度有机化合物, 属于三唑并嘧啶类衍生物。其分子结构包含环丙基、二氟苯基、三唑并嘧啶环和环戊二醇等官能团, 具有显著的立体化学复杂性。该化合物为白色至类白色固体, 易溶于极性有机溶剂如 DMSO 和甲醇, 但在水中溶解度较低。其分子量较大 (538.567), 且因含有磺酰基和羟基等极性基团, 表现出一定的亲水性和反应活性。

### 2. 生物化学功能与重要性

作为替格瑞洛的合成中间体或降解产物, 该杂质在药物质量控制中具有重要参考价值。其结构中的三唑并嘧啶核心与 P2Y<sub>12</sub> 受体拮抗活性相关, 可能影响血小板聚集抑制功能。在药物研发中, 对该杂质的监测有助于评估替格瑞洛的稳定性和工艺一致性, 确保最终药品的安全性与有效性。

### 3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于以下领域:

- 药物分析: 作为替格瑞洛原料药及制剂的质量控制标准品, 用于 HPLC 或 LC-MS 方法开发与验证。
- 工艺研究: 在合成工艺优化中作为关键中间体或杂质对照品, 帮助识别和减少副

产物生成。

- 稳定性研究：通过加速降解实验评估药物在不同环境条件下的降解途径。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议在-20° C 下避光保存，长期储存需置于惰性气体（如氮气）环境中以保持稳定性。使用前需平衡至室温并避免反复冻融。溶解时推荐使用 DMSO 配制母液，后续用缓冲液稀释至工作浓度。操作时应佩戴防护手套和护目镜，确保通风良好。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 验证纯度 $\geq 96\%$ ，并符合严格的结构确证标准（包括 NMR 和 HRMS）。安全数据表明，其具有潜在刺激性，避免吸入或接触皮肤。如意外接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置需遵循当地化学品管理法规。

注：以上信息基于现有研究数据，具体应用需结合实验条件进一步验证。