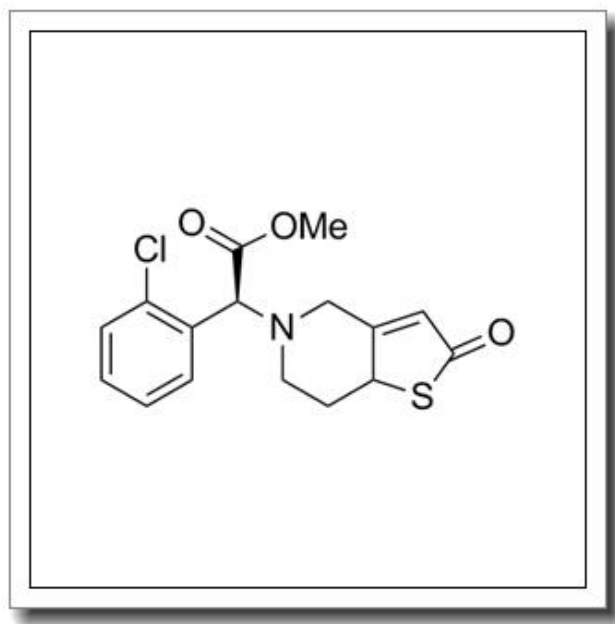


氯吡格雷硫代内酯

methyl (2S)-2-(2-chlorophenyl)-2-(2-oxo-4,6,7,7a-tetrahydrothieno[3,2-c]pyridin-5-yl)acetate



产品基本信息

属性	值
化学名称	methyl (2S)-2-(2-chlorophenyl)-2-(2-oxo-4,6,7,7a-tetrahydrothieno[3,2-c]pyridin-5-yl)acetate
中文名称	氯吡格雷硫代内酯
CAS 号	1147350-75-1
分子式	C ₁₆ H ₁₆ ClN ₀ S ₃
分子量	337.821
纯度	≥ 96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

氯吡格雷硫代内酯 (methyl (2S)-2-(2-chlorophenyl)-2-(2-oxo-4,6,7,7a-tetrahydrothieno[3,2-c]pyridin-5-yl)acetate) 是一种重要的医药中间体, CAS 号为 1147350-75-1, 分子式为 C₁₆H₁₆ClN₃O₃S, 分子量为 337.821。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 纯度 ≥96%, 具有特定的手性中心 (2S 构型), 其结构中含有氯苯基、硫代内酯环和酯基等关键官能团, 化学性质稳定, 但在强酸或强碱条件下可能发生水解或降解。

2. 生物化学功能与重要性

氯吡格雷硫代内酯是抗血小板药物氯吡格雷 (Clopidogrel) 合成过程中的关键中间体。氯吡格雷是一种前药, 需在体内代谢活化后发挥抗凝血作用, 而该硫代内酯结构是代谢途径中的重要衍生物。其通过抑制 ADP 受体 (P2Y₁₂) 信号通路, 阻断血小板聚集, 在心血管疾病治疗中具有重要地位。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药研发与生产领域, 具体包括:

- 作为氯吡格雷及其类似物的合成中间体, 用于抗血栓药物的工艺开发。
- 用于药物代谢研究, 探索硫代内酯结构在生物转化中的作用机制。
- 作为标准品或对照品, 用于质量控制和分析方法验证。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C 至 4° C 的干燥环境中避光保存, 长期储存需充惰性气体 (如氮气) 保护。使用时需在干燥环境下操作, 避免接触水分或强氧化剂。溶解性测试表明, 该化合物易溶于二甲基亚砷 (DMSO) 和甲醇, 但在水溶液中稳定性较差, 建议现配现用。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC、NMR 和质谱进行严格质量控制, 确保纯度 ≥96%。安全信息如下:

- 可能对眼睛、皮肤和呼吸道有刺激性，操作时需佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩。
- 若不慎接触，应立即用大量清水冲洗，并就医咨询。
- 废弃物需按危险化学品规范处置，避免环境污染。

以上信息仅供参考，具体实验或生产应用需结合专业文献和法规要求进一步验证。