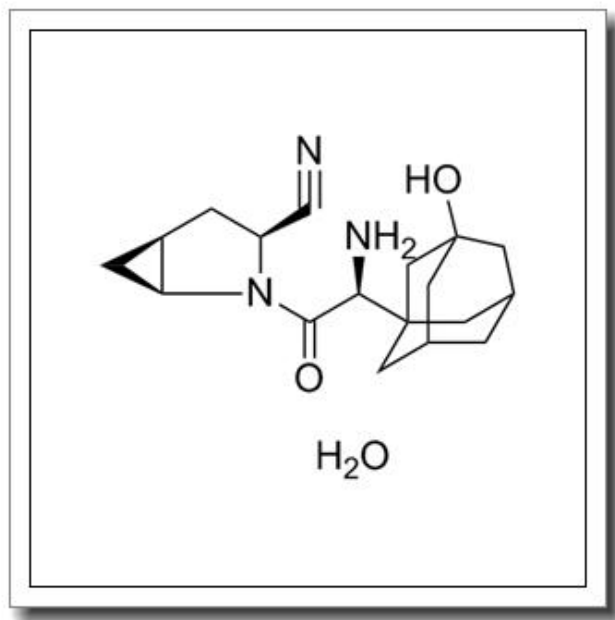


沙格列汀单水化合物

saxagliptin hydrate



产品基本信息

属性	值
化学名称	saxagliptin hydrate
中文名称	沙格列汀单水化合物
CAS 号	945667-22-1
分子式	C ₁₈ H ₂₇ N ₃ O ₃
分子量	333.425
纯度	≥ 96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

沙格列汀单水合物 (Saxagliptin hydrate) 是一种重要的二肽基肽酶-4 (DPP-4) 抑制剂, 化学名称为(1S, 3S, 5S)-2-[(2S)-2-氨基-2-(3-羟基-1-金刚烷基)乙酰基]-2-氮杂双环[3.1.0]己烷-3-腈单水合物, CAS 号为 945667-22-1。其分子式为 C₁₈H₂₇N₃O₃, 分子量为 333.425, 纯度 ≥96%。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 易溶于二甲基亚砜 (DMSO), 微溶于水和甲醇。其单水合物形式在常温下稳定, 但需避免长期暴露于潮湿环境。

2. 生物化学功能与重要性

沙格列汀单水合物通过选择性抑制 DPP-4 酶, 延缓胰高血糖素样肽-1 (GLP-1) 和葡萄糖依赖性促胰岛素多肽 (GIP) 的降解, 从而增强胰岛素分泌并抑制胰高血糖素释放。这一机制使其成为 2 型糖尿病治疗的关键药物分子, 具有高效性和靶向性特点。其水合物形式在制剂过程中更易调控溶解性和生物利用度。

3. 主要应用领域与具体用途

该化合物主要用于以下领域:

- 药物研发: 作为 DPP-4 抑制剂类降糖药的核心原料, 用于合成沙格列汀片剂。
- 生化研究: 用于 DPP-4 酶活性测定、糖尿病机制研究及新型降糖药物筛选。
- 标准品制备: 作为 HPLC 和质谱分析中的对照品, 用于药品质量控制和代谢研究。

4. 储存条件与使用建议

储存条件: 应密封保存于 2-8°C 干燥环境中, 避免光照和吸湿。长期储存建议充氮保护。

使用建议:

- 实验前需平衡至室温, 避免冷凝水引入。
- 溶解时优先使用 DMSO 配制母液, 再用缓冲液稀释至工作浓度。
- 避免与强氧化剂接触, 操作时需佩戴防护手套和护目镜。

5. 质量控制与安全信息

本品通过 HPLC、NMR 和质谱进行严格质量控制，确保纯度 $\geq 96\%$ ，单杂 $\leq 0.5\%$ 。

安全信息：

- 危险类别：非危险化学品，但需避免吸入粉尘或直接接触黏膜。
- 应急处理：如接触皮肤，立即用清水冲洗 15 分钟；若吸入，转移至通风处。
- 废弃物处理：按实验室有机废弃物标准程序处置，符合 EPA 和 GMP 规范。

（注：实际使用前请查阅最新版物质安全数据表 MSDS）