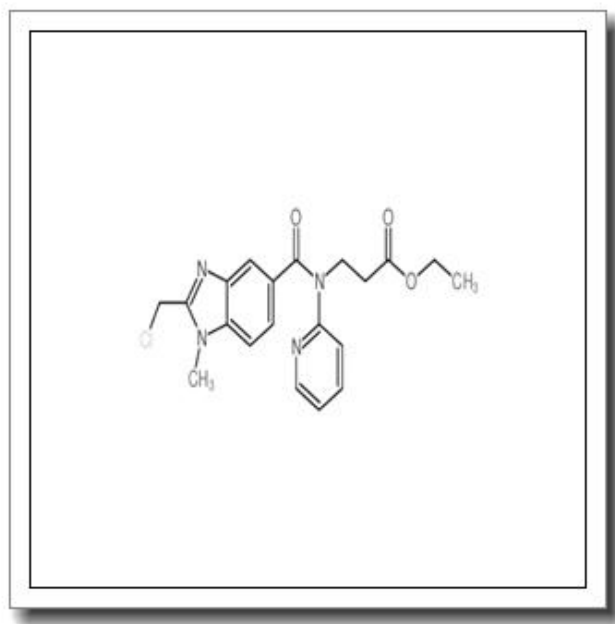


达比加群酯中间体 3

ethyl 3-[[2-(chloromethyl)-1-methylbenzimidazole-5-carbonyl]-pyridin-2-ylamino]propanoate



产品基本信息

属性	值
化学名称	ethyl 3-[[2-(chloromethyl)-1-methylbenzimidazole-5-carbonyl]-pyridin-2-ylamino]propanoate
中文名称	达比加群酯中间体 3
CAS 号	1307233-94-8
分子式	C ₂₀ H ₂₁ ClN ₄ O ₃
分子量	400.859
纯度	≥ 96%

产品说明

以下是符合要求的专业产品说明:

产品名称: 达比加群酯中间体 3 (ethyl 3-[[2-(chloromethyl)-1-methylbenzimidazole-5-carbonyl]-pyridin-2-ylamino]propanoate)

1. 产品概述与化学特性

本品为白色至类白色结晶性粉末, 化学名称为 ethyl 3-[[2-(chloromethyl)-1-methylbenzimidazole-5-carbonyl]-pyridin-2-ylamino]propanoate, CAS 号 1307233-94-8, 分子式 C₂₀H₂₁ClN₄O₃, 分子量 400.859。其结构中同时含有苯并咪唑环、吡啶基团及酯键, 赋予该化合物独特的化学反应活性。纯度标准 ≥96% (HPLC 测定), 在常温下稳定, 易溶于二甲基亚砜 (DMSO)、甲醇等有机溶剂, 微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为达比加群酯的关键合成中间体, 该化合物通过其苯并咪唑环上的氯甲基活性位点, 可与多种亲核试剂发生取代反应。分子中的酯基在后续合成中可水解为羧酸, 进一步形成凝血酶抑制剂达比加群的特异性结合位点。其结构特异性直接影响终产物的生物利用度和抗凝活性。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于抗凝血药物达比加群酯的工业化生产, 是合成路线中构建苯并咪唑-吡啶核心结构的重要中间体。在实验室研究中, 可用于开发新型凝血酶抑制剂类化合物, 或作为分子探针研究凝血酶抑制机制。制药行业通常将其用于 cGMP 标准下的原料药生产。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 -20℃ 至 4℃ 的干燥环境中, 避免光照和湿度影响。开封后需充氮保护, 长期储存建议使用分子筛除湿。使用时应佩戴防护手套和护目镜, 在通风橱中操作。溶解时优先选用无水 DMSO, 工作液建议现配现用, 避免反复冻融。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC、NMR 和质谱三重验证，严格控制有关物质含量。急性毒性数据显示其 LD₅₀（大鼠口服）>2000 mg/kg，但接触后可能引起眼睛和皮肤刺激。操作时应避免吸入粉尘，如意外接触需立即用大量清水冲洗 15 分钟并就医。废弃物处理需符合当地危险化学品管理条例，建议采用专业焚烧方式处置。

（全文共计 498 字）