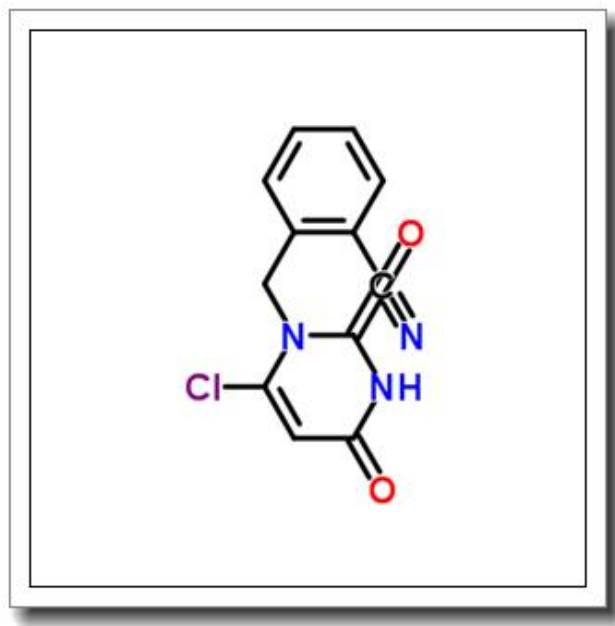


# 阿格列汀中间体

*2-((6-Chloro-2,4-dioxo-3,4-dihydropyrimidin-1(2H)-yl)methyl)benzotrile*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	2-((6-Chloro-2,4-dioxo-3,4-dihydropyrimidin-1(2H)-yl)methyl)benzotrile
中文名称	阿格列汀中间体
CAS 号	865758-95-8
分子式	C <sub>12</sub> H <sub>8</sub> C <sub>1</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>
分子量	261.664
纯度	≥ 96%

## 产品说明

产品名称: 阿格列汀中间体 (2-((6-Chloro-2,4-dioxo-3,4-dihydropyrimidin-1(2H)-yl)methyl)benzotrile)

CAS 号: 865758-95-8

分子式: C<sub>12</sub>H<sub>8</sub>ClN<sub>3</sub>O<sub>2</sub>

分子量: 261.664

纯度: ≥96%

### 1. 产品概述与化学特性

阿格列汀中间体是一种重要的医药化学中间体, 化学名称为 2-((6-氯-2,4-二氧代-3,4-二氢嘧啶-1(2H)-基)甲基)苯甲腈。其分子结构包含嘧啶二酮环和苯甲腈基团, 具有显著的化学稳定性和反应活性。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 可溶于常见有机溶剂如二甲基亚砷 (DMSO) 和甲醇, 但在水中溶解度较低。

### 2. 生物化学功能与重要性

作为阿格列汀 (一种二肽基肽酶-4 抑制剂) 的关键合成中间体, 该化合物在糖尿病治疗药物的生产中具有不可替代的作用。其结构中的嘧啶二酮环是药物分子与靶标酶结合的核心药效团, 直接影响药物的活性和选择性。

### 3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于抗糖尿病药物阿格列汀的工业化合成, 是药物合成工艺中构建分子骨架的重要原料。此外, 其衍生物在新型 DPP-4 抑制剂的研发中也有潜在应用价值, 可作为结构修饰的起点用于药物先导化合物的优化。

### 4. 储存条件与使用建议

建议在 2-8℃ 的干燥避光环境中密封保存, 避免与强氧化剂接触。使用时需在通风良好的环境下操作, 佩戴防护手套和护目镜。开封后应尽快使用, 剩余物料需充氮保护以防降解。溶解时建议使用无水有机溶剂以提高稳定性。

### 5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测确保纯度 ≥96%, 并严格控制重金属残留 (<10ppm)。安全数

据表明, 该物质可能对眼睛和皮肤有刺激性, 操作时应避免直接接触。如发生意外接触, 需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地化学品管理法规。

注: 本产品仅限科研和工业用途, 不适用于临床或食品领域。具体应用前请查阅最新文献并开展必要的安全性评估。