

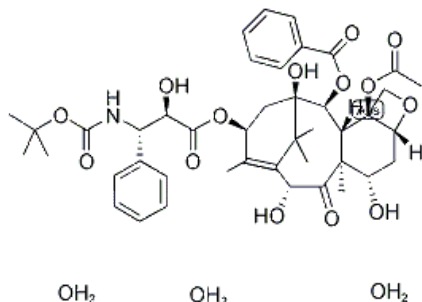
本PDF文件由

免费提供, 全部信息请点击[114977-28-5](#), 若要查询其它化学品请登录[CAS号查询网](#)如果您觉得本站对您的学习工作有帮助, 请与您的朋友一起分享:) [爱化学www.icchemistry.cn](#)

CAS Number:114977-28-5 基本信息

中文名:	多西他赛; 多烯紫杉醇
英文名:	Docetaxel
别名:	N-debenzoyl-N-tert-butoxycarbonyl-10-deacetyl taxol; Taxotere

分子结构:



分子式:	C ₄₃ H ₅₃ N ₃ O ₁₄
分子量:	807.88
CAS登录号:	114977-28-5

物理化学性质

熔点:	232°C
比旋光度:	-36° (C=0.74, EtOH)
性质描述:	多紫杉醇(114977-28-5)的性状: 1. 熔点232°C (甲醇)。[α] _D ²⁰ -36° (c=0.74, 乙醇)。 2. UV最大吸收: 230nm, 275nm, 283nm(ε14800, 1730, 1670)。

安全信息

安全说明:	S26: 万一接触眼睛, 立即使用大量清水冲洗并送医诊治。 S36/37: 穿戴合适的防护服和手套。
危险类别码:	R36/37/38: 对眼睛、呼吸道和皮肤有刺激作用。

CAS#114977-28-5化学试剂供应商(点击生产商链接可查看价格)

Sigma-Aldrich 专业从事114977-28-5及其他化工产品的生产销售 800-736-3690
 上海融禾医药科技发展有限公司 多西他赛专业生产商、供应商, 技术力量雄厚 13341702378 ;021-38218169
 供应商信息已更新且供应商的链接失效, 请登录爱化学 [CAS No. 114977-28-5 查看](#)
 若您在此化学品供应商, 请按照[化工产品收录](#)说明进行免费添加

其他信息

产品应用:	抗肿瘤植物药, 用于转移性乳腺癌和非小细胞肺癌。
	1. 多紫杉醇(114977-28-5)的制备方法: 1. 半合成以从欧洲紫杉属树木Taxus baccata L. Taxaceae的针叶中提取得到的10-deacetylbaccatin III为原料, 10-deacetylbaccatin III经酰化可得化合物(I)。

生产方法及其他:

2. [苯丙烯酸](#) (330mg, 2.24mmol)、二环己基[碳化二亚胺](#) (DOC, 460mg, 2.24mmol)、化合物 (I) (500mg, 0.56mmol) 和 4-[二甲氨基吡啶](#) (68mg, 0.56mmol), 在氩气下于70℃搅拌15h。冷却, 过滤, 滤饼用[甲苯](#)洗。洗液和滤液合并, 减压浓缩。往残液中加入 [二氯甲烷](#), 用2%[盐酸水](#)溶液洗, 无水[硫酸镁](#)干燥。减压蒸出溶剂, 剩下的1g残物用柱层析提纯, 以己烷-[乙酸乙酯](#) (7: 3) 洗脱, 得540mg化合物 (II), 收率94%。

3. N-[氯](#)-N-钠氨基[甲酸叔丁酯](#) (47mg, 0.27mmol) 和[硝酸银](#) (91.4mg, 0.54mmol) 或其他[金属盐](#)在2mL乙腈、甲苯或[吡啶](#)中, 搅拌10min。加入化合物 (II) (50mg, 0.049mmol) 和0.537mL[四氧化钨](#)和叔丁醇溶液 (0.1mmol/1mL), 在室温或4℃, 避光搅拌24h。过滤, 往滤液中加入0.22mmol亚[硫酸氢钠](#) (2.5%水溶液), 搅拌3h。用[二氯甲烷](#)提取反应液, 提取液干燥, 浓缩。用制备薄层层析来分离, 以7: 3的[乙醚](#)-己烷洗脱, 得到化合物 (III) 及其异构体, 化合物 (III) 的收率可达25%。以[硝酸汞](#)来代替[硝酸银](#)可提高收率。

4. 化合物 (III) (0.13mmol) 和150mg[锌粉](#)在5mL甲醇-[乙酸](#) (1: 1) 中, 在60℃下反应2h, 过滤, 浓缩, 以[乙酸乙酯](#)提取。用层析提纯, 以7: 3的[二氯甲烷](#)-甲醇洗脱, 得产物, 收率90%。

2. 参数:

- 1、疏水参数计算参考值 (XlogP): 1.6
- 2、氢键供体数量: 5
- 3、氢键受体数量: 14
- 4、可旋转化学键数量: 13
- 5、互变异构体数量: 18
- 6、拓扑分子极性表面积 (TPSA): 225
- 7、常温常压下稳定, 避免与强氧化剂接触。密封储存, 储存于阴凉、干燥的库房。

相关化学品信息

[十八烷基三甲基氯化铵](#) [2-甲基-1,3-戊二烯](#) [N-苄甲氧羰基-D-天冬氨酸-4-叔丁酯](#) [法尼基丙酮](#) [双\(叔丁基二甲基硅基\)-反式-钙泊三醇](#) [110764-72-2](#) [1-吡咯烷-1-环己烯](#) [1152313-76-2](#) [2-\(\(1R,2S\)-2-羟基-1,2-二苯基乙基氨基\)乙酸乙酯](#) [116237-97-9](#) [2,4,5-三氨基-6-氯嘧啶](#) [2,4,5-三氟-3-甲基苯甲酸](#) [S-3-氨基奎宁环胺盐酸盐](#) [118754-09-9](#) [8-羟基喹啉-N-氧化物](#) [硫氰酸铵](#) [氧化镆](#) [十二烷基三甲基溴化铵](#)