

本PDF文件由

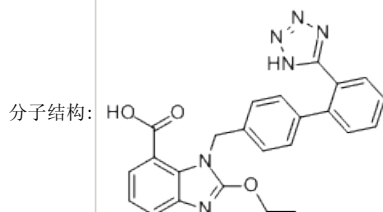
免费提供, 全部信息请点击[139481-59-7](#), 若要查询其它化学品请登录[CAS号查询网](#)如果您觉得本站对您的学习工作有帮助, 请与您的朋友一起分享:) [爱化学www.icchemistry.cn](#)

CAS Number:139481-59-7 基本信息

中文名: 坎地沙坦;
2-乙氧基-3-[[4-[2-(1H-四唑-5-基)苯基]苯基]甲基]-3H-苯并咪唑-4-羧酸

英文名: Candesartan

别名: 2-Ethoxy-3-[[4-[2-(1H-tetrazol-5-yl)phenyl]phenyl]methyl]-3H-benzoimidazole-4-carboxylic acid

分子式: $C_{24}H_{20}N_6O_3$

分子量: 440.45

CAS登录号: 139481-59-7

物理化学性质

熔点: 183-185°C

性质描述: 类白色结晶粉末, 熔点183-185°C

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: 穿戴合适的防护服装。

危险类别码: R20/21/22: 吸入、皮肤接触和不慎吞咽有害。
R36/37/38: 对眼睛、呼吸道和皮肤有刺激作用。

CAS#139481-59-7化学试剂供应商(点击生产商链接可查看价格)

供应商信息已更新, 请登录爱化学 [CAS No. 139481-59-7](#) 查看
若您是此化学品供应商, 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: 坎地沙坦(139481-59-7)的用途:
抗高血压药物。
血管紧张素II-1型受体拮抗剂。
酯为前体药物, 在人体中水解为酸而产生作用。

坎地沙坦(139481-59-7)的生产方法:
35g 3-硝基邻苯二甲酸溶于含20ml浓硫酸的300ml乙醇中, 回流24h。减压浓缩, 剩余物倾入700ml冷水。用乙酸乙酯萃取, 萃取液经水洗后, 和碳酸钾溶液一起搅拌。水层用盐酸调至酸性, 然后用二氯甲烷萃取。萃取液经水洗后干燥, 浓缩, 得29g剩余物I, 收率74%, 不用提纯, 直接用于下步反应。

23.9g化合物I和12ml氯化亚砷溶于150ml苯中, 回流3h。浓缩至干, 将得到的28g酰氯化物溶于20ml二氯甲烷。在剧烈搅拌下, 将其滴加到9.75g叠氮化钠溶于20mlDMF、的溶液中。将反应液倾入200ml 3: 1的乙醚-己烷和250ml水

生产方法及其他:

的混合液中，分层。有机层经水洗后干燥，蒸去溶剂，剩余物溶于200ml叔丁醇，搅拌下缓慢加热，然后回流2h。减压浓缩，得30g油状的化合物II。

20g化合物II溶于50ml THF中，搅拌和冰浴冷却下，加入2.8g. NaH(60%的矿物油悬浮液)，室温搅拌20min。加入18g 4-(2-氰基苯基)苄基溴和360mgKI，然后回流10h。浓缩至干，剩余物在250ml水和200ml乙醚之间进行分配。有机层经水洗后干燥，浓缩，将剩余物溶于60ml三氟乙酸和40ml二氯甲烷中，室温搅拌1h。浓缩至干，剩余物用200ml乙醚结晶。过滤收集，乙醚洗，得22.1g化合物III，为淡黄色的结晶，mp118~119℃，收率85%。

10.4g化合物III溶于50ml乙醇，加入28.1g SnCl₂·2H₂O，在80℃搅拌2h。浓缩至干，剩余物溶于300ml乙酸乙酯，在冰浴冷和搅拌下，滴加500ml 2mol/LNaOH。分出的水层用乙酸乙酯(200ml×2)萃取，萃取液和有机层合并，水洗，干燥。溶液浓缩至干，剩余物经硅胶柱层析，得到的粗晶体经乙酸乙酯-己烷重结晶，得7.3g无色结晶的化合物IV，mp104~105℃，收率79%。

1.0g化合物IV溶于5ml原碳酸乙酯，加入0.2g乙酸，在80℃搅拌1h。浓缩，剩余物溶于乙酸乙酯，用碳酸氢钠水溶液和水洗，蒸发结晶。再经乙酸乙酯-苯重结晶得0.79g无色结晶的化合物V，mp131~132℃，收率69%。

0.7g化合物V和0.7g三甲基锡叠氮化物溶于15ml甲苯，回流4天。浓缩至干，往剩余物中加入20ml甲醇和10ml 1mol/L盐酸，在室温搅拌30min，再用1mol/L氢氧化钠调至Ph=3~4。蒸出溶剂，剩余物在氯仿和水之间进行分配。有机层经水洗后干燥，浓缩至干后经硅胶柱层析，再经乙酸乙酯-苯重结晶，得0.35g无色结晶的化合物VI，mp 158~159℃，收率45%。

0.24g化合物VI和1.5ml 1mol/LNaOH溶于4ml乙醇，在80℃搅拌1h。浓缩后加入水和乙酸乙酯，分出水层，用1mol/L盐酸调至Ph=3~4后析出结晶。经乙酸乙酯-甲醇重结晶后，得0.15g无色结晶的坎地沙坦，mp183~185℃，收率67%。

相关化学品信息

[135579-87-2](#) [136013-79-1](#) [2-甲基-1-丁醇](#) [132115-55-0](#) [135130-97-1](#) [13617-40-8](#) [131811-56-8](#) [13730-36-4](#) [131513-72-9](#) [13896-06-5](#) [130985-78-3](#) [130835-44-8](#) [\(1R,2R\)-\(+\)-N,N-二甲基-1,2-双\[3-\(三氟醚甲基\)苯-1,2-乙烷二胺](#) [130343-14-5](#) [1335-12-2](#) [环丙基溴](#) [苯氧乙醇](#) [环己烯](#) 547