

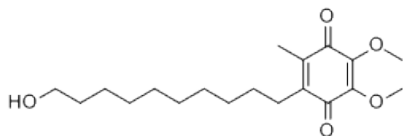
本PDF文件由

免费提供, 全部信息请点击[58186-27-9](#), 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.ichemistry.cn](#)

CAS Number:58186-27-9 基本信息

中文名:	艾地苯醌; 6-(10-羟基癸基)-2,3-二甲氧基-5-甲基-1,4-苯醌
英文名:	Idebenone
别名:	2-(10-Hydroxydecyl)-5,6-dimethoxy-3-methyl-cyclohexa-2,5-diene-1,4-dione; CV 2619

分子结构:

分子式: $C_{19}H_{30}O_5$

分子量: 338.44

CAS登录号: 58186-27-9

物理化学性质

性质描述:	艾地苯醌(58186-27-9)的性状: 1. 从石油醚得橙色针状结晶, 熔点46~50℃。 2. 从己烷-乙酸乙酯得结晶, 熔点52~53℃。 3. 极易溶于氯仿、甲醇或无水乙醇, 易溶于乙酸乙酯, 溶于多数有机溶剂, 难溶于正己烷, 几不溶于水。
-------	--

CAS#58186-27-9化学试剂供应商(点击生产商链接可查看价格)

随州天丰化工科技有限公司 专业从事58186-27-9及其他化工产品的生产销售 027-88325527

康宝泰精细化工有限公司 艾地苯醌专业生产商、供应商, 技术力量雄厚 027-87738695

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. 58186-27-9](#) 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: 中枢神经系统兴奋药。

1. 艾地苯醌(58186-27-9)的生产方法:

(1) 方法一:

①3,4,5-三甲氧基甲苯、10-乙酰氧基癸酰氯和三氯化铝在二氯乙烷中, 冰浴冷却搅拌2h, 再室温搅拌70h。倾入冰水, 二氯甲烷提取, 水洗, 干燥。蒸除溶剂, 得浅棕色油状的6-(10-乙酰氧基-1-氧代癸基)-2,3-二甲氧基-5-甲基苯醌。

②然后加入甲醇和氢氧化钠, 室温搅拌2h。蒸除溶剂, 加入水, 用盐酸调至pH值3。过滤析出的结晶, 真空干燥。粗品溶于氯仿, 用硅胶柱分离, 先用氯仿-甲醇(95:5)洗脱杂质, 再用氯仿-甲醇(90:10)洗脱, 收集所需组分, 蒸去溶剂, 用乙醚-己烷(1:3)重结晶, 得白色结晶的6-(10-羟基-1-氧代癸基)-2,3-二甲氧基-5-甲基苯醌, 熔点66.5~68℃, 收率63.1% (以3,4,5-三甲氧基甲苯计)。

③上述产物和醋酸、5%Pd-C及70%高氯酸一起, 于室温常压加氢20h以上。滤除催化剂后浓缩, 加入二氯甲烷, 用5%碳酸氢钠洗涤2次, 干燥。蒸除溶剂得浅黄色油状的6-(10-羟基癸基)-2,3-二甲氧基-5-甲基苯醌, 收率95%。该油状物和新制备的弗瑞麦盐(Frerny's salt)、二甲基甲酰胺-水-甲醇(1:1:1)和小量的磷酸二氢钾于50℃搅拌7h。反应完全后加水稀释, 用二氯甲烷提取, 水洗2次, 干燥。蒸除溶剂, 用正己烷-乙醚(3:1)重结晶, 得橘红色针状结晶的艾地苯醌(58186-27-9), 熔点54~55℃, 收率69.6%。

生产方法及其他:	(2)方法二: 3,4,5-三甲氧基甲苯和癸二酸单乙酯的酰氯,在三氯化铝催化下进行酰化反应,在2位酰化,再水解。然后还原生成10-(2-羟基-3,4-二甲氧基-6-甲基苯基)癸酸,接着氧化为醌,乙酯化再还原酯基为羟基而得该产品。和方法1的区别仅在于先氧化为醌,而后还原侧链,操作方法和方法1均相似。 2. 艾地苯醌(58186-27-9)的药理毒理: 本品为脑代谢、精神症状改善药,可激活脑线粒体呼吸活性,改善脑缺血的脑能量代谢,改善脑内葡萄糖利用率,使脑内ATP产生增加,抑制脑线粒体生成过氧化脂质,抑制脑线粒体膜脂质过氧化作用所致的膜障碍。本品毒副反应低,LD₅₀小鼠、大鼠>10000mg/kg,大鼠20mg/(kg·d)口服半年,狗100mg/(kg·d)口服1年未见明显毒性反应,无致畸、致癌、致突变作用。 3. 药代动力学: 据资料报道,6例脑卒中后遗症患者饭后口服本品30mg,Tmax为3.31小时,Cmax为290μg/ml,消除半衰期为7.69小时,尿中未检出原形药物,均为代谢物,24小时内尿中排泄率7.32%。 4. 适应症: 慢性脑血管病及脑外伤等所引起的脑功能损害。能改善主观症状、语言、焦虑、抑郁、记忆减退、智能下降等精神行为障碍。 5. 用法用量: 口服:成人每次30mg(1片),每日3次,饭后服用。 6. 不良反应: 不良反应发生率3%左右,主要有过敏反应、皮疹、恶心、食欲不振、腹泻、兴奋、失眠、头晕等。偶见白细胞减少、肝功能损害。 7. 注意事项: 长期服用,要注意检查GOT、GPT等肝功能。 8. 孕妇及哺乳期妇女用药: (1)对孕妇给予本品安全性还未完全确定,因而对妊娠妇女禁用。 (2)由于本药可向母乳中传递,因而授乳妇女应慎用。 9. 贮藏: 室温保存。 10. 有效期: 2年。 11. 标准号: WS-269(X-231)-96。 12. 活性成份: 6-(10-羟基癸基)-2,3-二甲氧基-5-甲基-1,4-苯醌。按干燥品计算,含C₁₉H₃₀O₅不得少于98.5%。 13. 鉴别: (1)取有关物质检查项下的溶液2ml加胍基醋酸乙酯1ml,振摇,再加氢氧化钾无水乙醇溶液(1→20)2ml,振摇,应显兰色,放置后,暂变为绿色。 (2)取吸收系数项下的溶液,照分光光度法测定,在278nm的波长处有最大吸收。取该溶液25ml,加硼氢化钠5mg,振摇使溶解后,再测定,则在278nm波长处的最大吸收消失,而在290nm的波长处出现最大吸收。 (3)红外光吸收图谱应与对照品的图谱一致。 14. 检查: 有关物质取本品,照含量测定项下的方法,加流动相溶解并定量稀释成每1ml中含0.2mg的溶液,作为供试品溶液;量取适量,加流动相稀释成每1ml中含0.04mg的溶液,作为对照溶液。取对照溶液20μl注入液相色谱仪进行预试,调节检测灵敏度,使主成分峰的峰高约为记录仪满量程的50~60%。再准确量取上述两种溶液各20μl,分别注入液相色谱仪,记录色谱图至主成分峰,保留时间的2倍。供试品溶液色谱图中如有杂质峰,按峰面积归一法计算杂质的总量,应不得大于总峰面积的0.8%。干燥失重取本品,置五氧化二磷干燥器中,减压干燥至恒重,减失重量不得过0.1%。炽灼残渣取本品1.0g,依法检查遗留残渣不得过0.1%。重金属取炽灼残渣项下遗留的残渣,依法检查含重金属不得过百万分之十。 15. 含量测定: 照高效液相色谱法测定。色谱条件与系统适用性试验用十八烷基硅烷键合硅胶为填充剂,甲醇-水(72:28)为流动相,检测波长为278nm,柱温30℃。理论板数按本药的峰计算应不低于2000,该药的峰与内标物质峰的分离度应大于5.0。内标溶液的制备取醋酸曲安缩松适量,精密称定,加流动相制成每1ml中约含0.60mg的溶液,摇匀,即得。测定法

	取该药对照品适量，精密称定，加流动相溶解并定量稀释制成每1ml中含0.2mg的溶液，精密量取对照品溶液5ml与内标溶液10ml置25ml量瓶中，加流动相稀释至刻度，摇匀，取20μl注入液相色谱仪，记录色谱图；另取本品适量，同法测定，按内标法以峰面积计算，即得。
相关化学品信息	
1,1-二苄肼 2,6,10-三甲基-(5E)-5,9-十一烷二烯-1-醇 丙烯酸乙酯与丙烯酸丁酯、丙烯腈和甲基丙烯酸缩水甘油基酯的共聚物 3-乙酰氨基嘧啶 58775-38-5 58889-64-8 B-丙氨酸叔丁酯盐酸盐 5814-39-1 2,5-二氯苯硫酚 58475-97-1 环戊丙酸酐酮 2,6-萘二磺酸 5898-27-1 N,4-二甲基-1,2,5-恶二唑-3-甲胺 异戊酸异丁酯 磷酸锌 邻氨基苯甲酸 乙烯基吡咯烷酮 526	