

医药中间体手册

下册

许关煜 主编

李敏华 副主编
刘玲玲



4-63

89

科技出版中心
出版社

医药中间体手册

(下 册)

许关煜 主 编
李敏华 副主编
刘玲玲

化 学 工 业 出 版 社
现代生物技术与医药科技出版中心
· 北 京 ·

(京)新登字 039 号

图书在版编目 (CIP) 数据

医药中间体手册. 下册/许关煜主编. —北京: 化学工业出版社, 2002. 1
ISBN 7-5025-3540-3

I. 医… II. 许… III. 药品-中间体-工业产品目录-中国 IV. TQ460.4-63

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2001) 第 087301 号

医药中间体手册

(下 册)

许关煜 主编

李敏华 刘玲玲 副主编

责任编辑: 杨立新

责任校对: 洪雅姝

封面设计: 于 兵

*

化 学 工 业 出 版 社 出版发行
现代生物技术与医药科技出版中心

(北京市朝阳区惠新里 3 号 邮政编码 100029)

发行电话: (010) 64918013

<http://www.cip.com.cn>

*

新华书店北京发行所经销

化学工业出版社印刷厂印刷

三河市东柳装订厂装订

开本 787×1092 毫米 1/16 印张 17 $\frac{3}{4}$ 字数 435 千字

2002 年 1 月第 1 版 2002 年 1 月北京第 1 次印刷

ISBN 7-5025-3540-3/R·106

定 价: 56.00 元

版权所有 违者必究

该书如有缺页、倒页、脱页者, 本社发行部负责退换

编写说明

建立新中国以来,经过数十年的开拓,我国的医药工业取得了巨大的成就。就产量而言,我国已称得上制药大国,原料药的产量仅次于美国,居世界第二。据1997年统计,全国共有化学制药企业1800家,生产1400多个原料药品种,总产量18万吨,产值1234亿元。出口量7.5万吨,价值9.6亿美元。

作为医药工业高速发展基础的中间体生产也有长足进步。以往中间体生产多分散在各原料药厂,自行配套,产量小,设备和工艺落后,无法取得规模效应。随着医药工业的发展壮大,特别是近年对药品质量要求日趋严格,新药开发难度增大,市场竞争激烈,原料药厂倾向于尽可能多地外购中间体(国外制药业也呈这种趋势),以集中精力生产最终产品,并降低成本。而另一方面,药物品种繁多,生产工艺复杂,所用中间体更是五花八门,虽然数量不大,但属市场的迫切需求。一些有实力的化工企业凭借其开发和经营能力,专事医药中间体生产,依靠先进的技术、稳定的质量、合理的价格,获得了很好的效益,不断发展壮大。在改革开放的形势下,随着企业所有制开放搞活及产业结构调整,几乎在全国各地,特别是浙江、江苏等省有一批中间体专业工厂兴起。这就是说,医药中间体生产已不再局限于药厂,还有许多其他行业的力量加盟,中间体生产正逐渐形成独立的体系。

编者所在单位国家经济贸易委员会医药工业信息中心站(上海医药工业研究院信息研究室)历年曾编印过《有机中间体索引》、《全国有机药物中间体索引》等资料,受到医药科研、生产和经营有关人员的欢迎。在以往工作的基础上,我们编写了这本《医药中间体手册》,供从事生产、科研、供销和经营管理人员参考。

本书收录的为我国生产和开发的重要药物中间体品种及其主要技术信息。为方便检索,医药中间体条目以分子式排序,内容包括中文名、异名、英文名、美国化学文摘化学物质登录号(CAS Number)、结构式、相对分子质量、性质、制法、用途、参考文献、生产单位。中文名和异名仅择常用的通俗名称;英文名则尽可能搜集多种异名,特别是包含了与习用名有很大差异的美国化学文摘(以下简称CA)采用的名称。例如胍乙啶中间体庚内酰胺(heptolactam, $C_7H_{13}NO$), CA采用名为六氢-2(1*H*)-吡辛因酮[hexahydro-2(1*H*)-azocinone];阿昔洛韦中间体乙酸2-((乙酰氧基)甲氧基)乙酯[acetic acid 2-(acetyloxy) methoxy) ethyl ester, $C_7H_{12}O_5$], CA采用名为2-氧杂-1,4-丁二醇二乙酸酯(2-oxa-1,4-butanediol diacetate);丙戊酸钠(或镁)中间体二丙基氰乙酸甲酯(dipropyl cyanoacetic acid methyl ester, $C_{10}H_{17}NO_2$), CA采用名为2-氰基-2-丙基戊酸甲酯(methyl 2-cyano-2-propylpentanoate)。这样,借助于本书,读者在进一步查阅文献时将大为方便。

化学物质登录号的列入可便于确认所需查找的化合物,如使用CA光盘或联机检索,从化学物质登录号入手,并根据检索目的,如制备、用途等限定查找范围,可迅速获得所需信息。此外,众所周知,由化学物质登录号可从CAS Registry Handbook找到相应化合物的名称,对查阅印刷版的CA带来便利。性质项目之下的数据均来自于文献。结晶物质后的括号内所注为得到该晶形的途径:如“升华”则为升华得到;“乙醇”则为从乙醇中析出。熔点或沸点后加注括号的为不同文献来源的数据。当今化学物质对环境及人类健康的影响越来越受到关注,故见诸文献的有关中间体的这方面信息也被列入。药物的生理活性与其构型密切相关,应用单一异构体药物势在必行。有关中间体立体构型的内容在本书中受到充分重视。用途主要作何种药物的中间体。参考文献(除CA外)主要有制备方法,采用通用的缩写方式列出。同一出版物不同卷号的文献以斜

线 (/) 隔开, 以紧缩篇幅。

由于医药中间体生产企业分布于多个产业领域, 很难统计和汇总各企业产品品种等方面的可靠数据, 估计制药行业目前需用的重要中间体达 2000 余种, 每年需 200 多万吨。随着药物品种的不断更新和生产工艺改进, 中间体的种类也在不断增加。鉴于资料收集方面的诸多困难, 收集的品种尚不够全, 生产单位没有全面补充更新, 严格说来本书所列生产单位也可能为“曾生产单位”。编写本书时参阅了拥有 38 万个化合物信息的大型数据库《The Combined Chemical Dictionary On CD-ROM》由 Chapman & Hall 公司电子出版部出版等。鉴于工作量巨大, 本书分为上、下两册出版, 上册包括 $C_1 \sim C_{10}$ 的中间体, 计 1140 个条目, 下册为 C_{11} 以后的化合物, 上、下册书后各附有中英文名称索引和 CAS 登录号索引。

本书由许关煜主编, 李敏华、刘玲玲为副主编。参加编写的有杨新芳、陈章义、俞晓东、冉崇昭、许心晔、于宏、周婉容、宋黎梦、傅强、包科彦、陆燕玲、沈秋凤、徐官根、钱磊、钟静芬、张荷娜等。本书在编写过程中得到编者所在单位领导和同事的大力支持, 在此谨向欧阳泰、周斌、李以欣、杨世安等同志表示诚挚的谢意。

编 者
2000 年 7 月

内 容 提 要

本书由国家经贸委医药工业信息中心站组织编写。书中收集了国内生产或试制的各类医药中间体 2000 余个, 主要包括: 化合物名称(中文名、异名、商品名、英文名等)分子式 结构式、相对分子质量、性质、制法、用途、参考文献。全书分上册($C_1 \sim C_{10}$), 下册($C_{11} \sim C_{35}$), 按分子式编排。为便于检索和识别, 还列有化合物的 CAS 登录号, 并注明国内生产单位。

书后附有三套索引, 即 CAS 登录号、英文名、中文名。

可供从事医药及中间体科研、生产、管理等部门的技术人员查阅, 也可作为农药、染料、精细化工、有机合成专业的教学参考。

目 录

C_{11}	<p>1~5 1</p> <p>6~9 2</p> <p>10~14 3</p> <p>15~19 4</p> <p>20~23 5</p> <p>24~28 6</p> <p>29~33 7</p> <p>34~38 8</p> <p>39~43 9</p> <p>44~47 10</p> <p>48~51 11</p> <p>52~56 12</p> <p>57~60 13</p> <p>61~65 14</p> <p>66~70 15</p> <p>71~74 16</p> <p>75~79 17</p> <p>80~83 18</p> <p>84~88 19</p> <p>89~93 20</p> <p>94~97 21</p> <p>98~102 22</p> <p>103~107 23</p>	<p>70~73 40</p> <p>74~77 41</p> <p>78~81 42</p> <p>82~87 43</p> <p>88~89 44</p>
C_{12}	<p>1~5 25</p> <p>6~10 26</p> <p>11~14 27</p> <p>15~18 28</p> <p>19~23 29</p> <p>24~28 30</p> <p>29~32 31</p> <p>33~36 32</p> <p>37~41 33</p> <p>42~46 34</p> <p>47~51 35</p> <p>52~56 36</p> <p>57~59 37</p> <p>60~64 38</p> <p>65~69 39</p>	<p style="text-align: center;">C_{13}</p> <p>1~5 45</p> <p>6~10 46</p> <p>11~14 47</p> <p>15~19 48</p> <p>20~24 49</p> <p>25~29 50</p> <p>30~33 51</p> <p>34~37 52</p> <p>38~42 53</p> <p>43~46 54</p> <p>47~51 55</p> <p>52~55 56</p> <p>56~59 57</p> <p>60~64 58</p> <p>65~69 59</p> <p>70~73 60</p> <p>74~78 61</p> <p>79~83 62</p> <p>84~87 63</p> <p>88~92 64</p> <p>93~96 65</p> <p>97~100 66</p> <p>101~104 67</p> <p>105~109 68</p>
		<p style="text-align: center;">C_{14}</p> <p>1~5 70</p> <p>6~10 71</p> <p>11~14 72</p> <p>15~19 73</p> <p>20~24 74</p> <p>25~28 75</p> <p>29~33 76</p> <p>34~38 77</p> <p>39~42 78</p>

43~46	79
47~51	80
52~56	81
57~61	82
62~66	83
67~70	84
71~74	85
75~79	86
80~83	87
84~88	88
89~92	89
93~96	90

C₁₅

1~4	91
5~8	92
9~12	93
13~16	94
17~21	95
22~26	96
27~31	97
32~36	98
37~40	99
41~45	100
46~49	101

C₁₆

1~5	102
6~9	103
10~13	104
14~18	105
19~23	106
24~28	107
29~31	108
32~35	109

C₁₇

1~4	110
5~10	111
11~14	112
15~18	113
19~23	114
24	115

C₁₈

1~4	116
5~8	117

9~12	118
13~17	119
18~19	120
20~23	121
24~26	122
27~31	123

C₁₉

1~4	125
5~8	126
9~14	127
15~18	128
19~22	129
23~26	130
27~30	131
31~34	132
35	133

C₂₀

1~4	134
5~8	135
9~12	136
13~16	137
17~20	138
21~23	139

C₂₁

1~5	140
6~9	141
10~12	142
13~16	143
17~20	144
21~23	145
24~27	146
28~31	147
32~34	148
35~37	149
38~41	150
42~43	151

C₂₂

1~4	152
5~8	153
9~12	154
13~15	155
16~19	156
20~23	157

24~26	158
27~30	159
31~33	160
34~36	161
37~39	162
40~43	163
44	164

C₂₃

1~4	165
5~7	166
8~10	167
11~13	168
14~16	169
17~19	170
20~22	171
23~26	172
27	173

C₂₄

1~3	174
4~6	175
7~9	176
10~11	177
12~14	178
15~17	179
18~21	180
22~24	181
25~27	182
28~30	183
31	184

C₂₅

1~3	185
-----	-----

4~6	186
7~9	187
10~13	188
14~16	189
17~20	190

C₂₆

1~4	192
5~7	193
8~11	194
12~14	195

C₂₇

1~4	197
5~7	198
8	199

C₂₈

1~4	200
-----	-----

C₂₉

1~4	202
-----	-----

C₃₀

1~2	204
-----	-----

C₃₁

1	205
---	-----

C₃₄

1~2	206
-----	-----

C₃₅

1	207
---	-----

索 引

CAS 登录号	208
英文名称	215
中文名称	247

C₁₁

序号 1

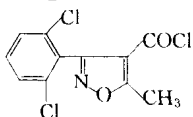
分子式 C₁₁H₆Cl₃NO₂

化学名 3-(2,6-二氯苯基)-5-甲基-4-异噁唑甲酰氯

英文名 3-(2,6-dichlorophenyl)-5-methyl-4-isoxazolecarbonyl chloride

CAS 登录号 [4462-55-9]

结构式



相对分子质量 290.53

制法 用2,6-二氯甲苯以氯气、三氯化磷在紫外线催化下氯化,生成2,6,α,α-四氯甲苯,然后与盐酸羟胺在浓硫酸参与下脞化,得2,6-二氯苯甲脞,再经氯化得2,6-二氯苯甲脞氯,进而与乙酰乙酸乙酯在氢氧化钠作用下环合,生成3-(2,6-二氯苯基)-5-甲基-4-异噁唑甲酸乙酯,最后酯基水解,以五氯化磷氯化羧基制得本品。

用途 双氯苯唑青霉素钠的中间体(侧链)。

参考文献 CA 120: P217654x/124; P55677k。

生产单位 上海四药股份有限公司。

序号 2

分子式 C₁₁H₇ClOS

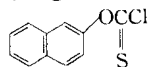
化学名 硫代氯甲酸-O-2-萘酯

异名 氯甲硫羧酸-2-萘酯

英文名 carbonochloridothioic acid O-2-naphthalenyl ester, 2-naphthyl thiochloroformate

CAS 登录号 [10506-37-3]

结构式



相对分子质量 222.70

制法 用β-萘酚钠与硫代光气在低温下反应制得。

用途 发癣退的中间体。

参考文献 CA 116: 58982b, 173833r/119; P95126h/120; P134446e, P134466m/122; P291458n。

生产单位 上海三维制药有限公司。

序号 3

分子式 C₁₁H₇Cl₂NO₂

化学名 3-(2-氯苯基)-5-甲基-4-异噁唑甲酰氯

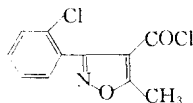
异名 3-(邻氯苯基)-5-甲基-4-异噁唑甲酰氯

英文名 3-(2-chlorophenyl)-5-methyl-4-isoxazolecar-

bonyl chloride, 3-(*o*-chlorophenyl)-5-methyl-4-isoxazolecarbonyl chloride

CAS 登录号 [25629-50-9]

结构式



相对分子质量 256.09

制法 用邻氯苯甲醛与盐酸羟胺在碱性条件下脞化,生成邻氯苯甲脞,然后以氯气氯化得邻氯苯甲脞氯,进而与乙酰乙酸乙酯环合并水解酯基,生成3-(邻氯苯基)-5-甲基-4-异噁唑甲酸,最后以五氯化磷氯化制得本品。

用途 氯苯唑青霉素钠的中间体。

参考文献 CA 122: 133044b/124; P55677k/125; 309163t。

生产单位 上海四药股份有限公司、上海宝山区盛桥化工厂、山西太原制药厂。

序号 4

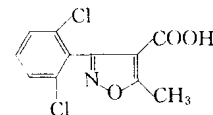
分子式 C₁₁H₇Cl₂NO₃

化学名 3-(2,6-二氯苯基)-5-甲基-4-异噁唑羧酸

英文名 3-(2,6-dichlorophenyl)-5-methyl-4-isoxazolecarboxylic acid

CAS 登录号 [3919-76-4]

结构式



相对分子质量 272.01

制法 用2,6-二氯甲苯以氯气、三氯化磷在紫外线催化下氯化,生成2,6,α,α-四氯甲苯,然后与盐酸羟胺在浓硫酸作用下脞化得2,6-二氯苯甲脞,再经氯化得2,6-二氯苯甲脞氯,进而与乙酰乙酸乙酯环合生成3-(2,6-二氯苯基)-5-甲基-4-异噁唑甲酸乙酯。将后者以碱水解后酸化得到本品。

用途 双氯苯唑青霉素钠的中间体(侧链)。

参考文献 CA 120: P217654x/124; P55677k。

生产单位 上海四药股份有限公司。

序号 5

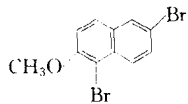
分子式 C₁₁H₈Br₂O

化学名 1,6-二溴-2-甲氧基萘

英文名 1,6-dibromo-2-methoxynaphthalene

CAS 登录号 [66996-59-6]

结构式



相对分子质量 315.99

制法 用β-萘酚经醚化, 溴代制得。

用途 萘普生和萘丁美酮的中间体。

参考文献 CA 89: 173402y, 196452d、中国医药工业杂志 1991, 22 (8): 369。

生产单位 天津新新药业公司。

序号 6

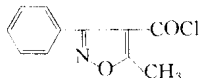
分子式 $C_{11}H_8ClNO_2$

化学名 5-甲基-8-苯基-4-异噁唑甲酰氯

英文名 5-methyl-3-phenyl-4-isoxazolecarbonyl chloride

CAS 登录号 [16883-16-2]

结构式



相对分子质量 221.64

性质 结晶。m. p. 184 C。

制法 用苯甲醛与盐酸羟胺在碱性条件下脎化, 生成苯甲脎, 然后以氯气氯化, 得到苯甲脎氯, 后者在碱作用下与乙酰乙酸乙酯环合并水解酯基, 得 5-甲基-3-苯基-4-异噁唑甲酸, 最后以五氯化磷氯化得到本品。

用途 苯唑青霉素钠的中间体。

参考文献 CA 124: P55677k, P316868j。

生产单位 上海先锋药业公司、重庆西南合成制药厂、四川成都四川制药厂、北京第三制药厂、山西太原制药厂、江苏苏州第三制药厂。

序号 7

分子式 $C_{11}H_8ClNO_3$

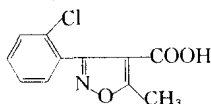
化学名 3-(2-氯苯基)-5-甲基-4-异噁唑羧酸

异名 3-(邻氯苯基)-5-甲基-4-异噁唑羧酸

英文名 3-(2-chlorophenyl)-5-methyl-4-isoxazolecarboxylic acid, 3-(o-chlorophenyl)-5-methyl-4-isoxazolecarboxylic acid

CAS 登录号 [23598-72-3]

结构式



相对分子质量 237.64

制法 用邻氯苯甲醛与盐酸羟胺在碱性条件下脎化, 生成邻氯苯甲脎, 然后以氯气氯化得邻氯苯甲脎氯, 后者与乙酰乙酸乙酯在碱作用下环合, 得 3-邻氯苯基-5-甲基-4-异噁唑羧酸乙酯, 最后以碱液水解并酸化制得

本品。

用途 氯苯唑青霉素钠的中间体(侧链)。

参考文献 CA 120: 271090y/123; P142994j。

生产单位 上海四药股份有限公司、上海宝山盛桥化工厂、山西太原制药厂。

序号 8

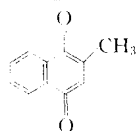
分子式 $C_{11}H_8O_2$

化学名 2-甲基-1,4-萘醌

异名 维生素 K₃英文名 2-methyl-1,4-naphthoquinone; 2-methyl-1,4-naphthalenedione, menadione; Kanone, Kapoaxin, Kayquinone, Thyloquinone, Vitamin K₃

CAS 登录号 [6147-37-1], [58-27-5]

结构式



相对分子质量 172.18

性质 亮黄色结晶(乙酸水溶液或乙醇)。m. p. 104~105 C (105~107 C), 不溶于水, 微溶于乙醇。对皮肤和呼吸道有刺激性。LD₅₀ (小鼠经口) 500mg/kg。

制法 可用β-甲基萘以重铬酸钾、硫酸氧化制得。

用途 合成亚硫酸氢钠甲萘醌(维生素 K₁)和乙酰甲萘醌(维生素 K₂)中间体。

参考文献 J. Biol. Chem. 1940, 133: 391, J. Am. Chem. Soc. 1941, 63: 2049/1954, 76: 6150, Chem. Ber. 1957, 90: 1879, Pharm. Bull. 1957, 5: 82, Bull. Chem. Soc. Jpn. 1982, 55: 1673, J. Chem. Soc. Perkin I 1988, : 559, Angew. Chem. Int. Ed. 1994, 33: 2475。

生产单位 上海申隆药业有限公司、安徽六安朝阳制药厂、四川成都四川医药院制药厂、江苏无锡县制药厂。

序号 9

分子式 $C_{11}H_8O_4$

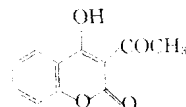
化学名 3-乙酰基-4-羟基-2H-1-苯并吡喃-2-酮

异名 3-乙酰基-4-羟基香兰素

英文名 3-acetyl-4-hydroxy-2H-1-benzopyran-2-one; 3-acetyl-4-hydroxycoumarin

CAS 登录号 [2555-37-5]

结构式



相对分子质量 204.18

性质 结晶(乙醇)。m. p. 138 C。

制法 可用乙酰基水杨酸以氯化亚硫酸氯化,生成乙酰基水杨酰氯,然后与乙酰乙酸乙酯缩合,得 α -(2-乙酰氧基苯甲酰基)乙酰乙酸乙酯。将后者以氢氧化钠溶液水解,得 α -(2-羟基苯甲酰基)乙酰乙酸钠,进而在硫酸作用下环合得到本品。

用途 新抗凝中间体。

参考文献 *Talanta* 15: 1043 (1968), *J. Org. Chem.* 1974, 39: 2436; *Tetrahedron* 1981, 37: 1131。

生产单位 上海第六制药厂。

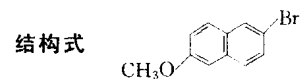
序号 10

分子式 $C_{11}H_9BrO$

化学名 2-溴-6-甲氧基萘

英文名 2-bromo-6-methoxynaphthalene

CAS 登录号 [5111-65-9]



相对分子质量 237.10

性质 m. p. 108 ~ 111°C (100 ~ 103°C)。有刺激性。

制法 用2-溴-6-萘酚以硫酸二甲酯甲基化制得。

用途 萘丁美酮的中间体。

参考文献 *Beil* 6: 651, *J. Am. Chem. Soc.* 1948, 70: 1279, 中国医药工业杂志 1990, 21 (5): 195。

生产单位 中国科学院上海药物研究所试制。

序号 11

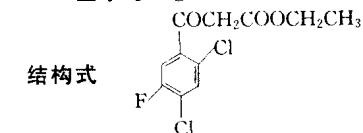
分子式 $C_{11}H_9Cl_2FO_3$

化学名 2-(2,4-二氯-5-氟苯甲酰基)乙酸乙酯

异名 2,4-二氯-5-氟- β -氧代苯丙酸乙酯

英文名 ethyl 2-(2,4-dichloro-5-fluorobenzoyl) acetoacetate, ethyl 2,4-dichloro-5-fluoro- β -oxo-benzenepropanoate

CAS 登录号 [86483-51-4]



相对分子质量 279.09

用途 诺氟沙星的中间体。

参考文献 *CA* 99: 53790h/101; P211165z, P230575z/102; P6525w, P6526x, P6542z, P62271x, P132068n/103; 123373b, 215134c/105; 6394q, P60423m, 60558j, P208769b, P226516w, *J. Med. Chem.* 1985, 28: 1558; 医药工业 1988, 19 (11): 481。

生产单位 中国医学科学院医药生物技术研究所试制(北京)。

序号 12

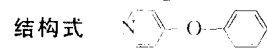
分子式 $C_{11}H_9NO$

化学名 4-苯氧基吡啶

异名 苯基(4-吡啶基)醚

英文名 4-phenoxy pyridine, phenyl-4-pyridyl ether

CAS 登录号 [4783-86-2]



相对分子质量 171.20

制法 用吡啶与氯化亚硫酸反应,生成N-(4-吡啶基)吡啶盐酸盐,然后与苯酚反应制得本品。

用途 抗菌剂奥替尼丁的中间体。

参考文献 *CA* 69: 43747r/72; 110080v/75; 76545a, 中国医药工业杂志 1991, 22 (8): 342。

生产单位 第二军医大学(上海)药学院药化教研室试制。

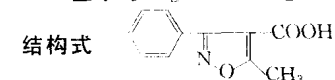
序号 13

分子式 $C_{11}H_9NO_3$

化学名 5-甲基-3-苯基-4-异噁唑甲酸

英文名 5-methyl-3-phenyl-4-isoxazolecarboxylic acid

CAS 登录号 [1136-45-4]



相对分子质量 203.20

性质 针状结晶。m. p. 191 ~ 193°C。LD₅₀大鼠腹腔 1500mg/kg。

制法 可用苯甲醛与盐酸羟胺在碱性条件下肟化,生成苯甲肟,然后以氯气氯化得苯甲肟氯。将后者与乙酰乙酸乙酯环合并将其酯基水解即得本品。

用途 苯唑青霉素钠的中间体(侧链酸)。

参考文献 *Chem. Pharm. Bull.* 1968, 16: 117, *Chem. Ber.* 1973, 106: 3275, *Helv. Chim. Acta* 1976, 59: 2074。

生产单位 上海先锋药业公司、重庆西南合成制药厂、四川成都四川制药厂、北京第三制药厂、江苏苏州第二制药厂。

序号 14

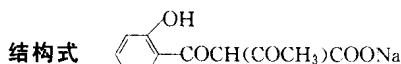
分子式 $C_{11}H_9NaO_3$

化学名 α -乙酰基-2-羟基- β -氧代苯丙酸单钠盐

异名 α -(邻羟基苯甲酰基)乙酰乙酸钠

英文名 α -acetyl-2-hydroxy- β -oxobenzenepropanoic acid monosodium salt, sodium α -(*o*-hydroxybenzoyl) acetoacetate

CAS 登录号 [54613-63-7]



相对分子质量 244.18

制法 用乙酰基水杨酸以氯化亚硫酸氯化,生成乙酰基水杨酰氯,然后与乙酰乙酸乙酯缩合,得到 α -(2-乙酰氧基苯甲酰基)乙酰乙酸乙酯,将后者以氢氧化钠水解制得本品。

用途 新抗凝的中间体。

参考文献 CA 82: P43124v。

生产单位 上海第六制药厂。

序号 15

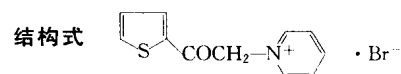
分子式 $C_{11}H_{10}BrNOS$

化学名 *N*-(2-噻吩羰甲基)溴化吡啶鎓

异名 1-(2-噻吩甲酰甲基)溴化吡啶鎓

英文名 *N*-(2-thiophenecarbonyl methyl)pyridinium bromide, 1-(2-thenoylmethyl)pyridinium bromide

CAS 登录号 [26031-47-0]



相对分子质量 284.18

性质 结晶。m. p. 197~200 C。

制法 用噻吩以乙酸酐酰化,生成2-乙酰基噻吩,然后以溴素在溴化亚铜参与下反应得到(2-溴代乙酰基)噻吩。将后者与吡啶成盐即得本品。

用途 噻吡吡啶的中间体。

参考文献 CA 72: 2509h, P55273h。

生产单位 重庆西南制药一厂。

序号 16

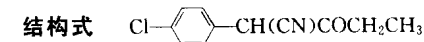
分子式 $C_{11}H_{10}ClNO$

化学名 4-氯- α -(乙基羰基)苯乙腈

异名 1-氰基-1-(对氯苯基)-2-丁酮

英文名 4-chloro- α -ethylcarbonyl benzeneacetonitrile, 1-cyano-1-(*p*-chlorophenyl)-2-butanone

CAS 登录号 [55474-40-3]



相对分子质量 207.66

制法 用对氯苯以氰化钠氰化,生成对氯苯腈,然后与丙酸乙酯在乙醇钠参与下缩合,生成1-氰基-1-(对-氯苯基)-1-丁烯-2-醇钠,后者以硫酸酸化得到本品。

用途 乙胺嘧啶的中间体。

参考文献 CA 105: 153022v。

生产单位 上海中西药业股份有限公司、重庆西南第二合成制药厂。

序号 17

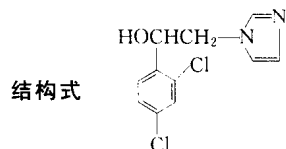
分子式 $C_{11}H_{10}Cl_2N_2O$

化学名 α -(2,4-二氯苯基)-1*H*-咪唑-1-乙醇

异名 1-[2-羟基-2-(2,4-二氯苯基)乙基]咪唑

英文名 α -(2,4-dichlorophenyl)-1*H*-imidazole-1-ethanol, 1-[2-hydroxy-2-(2,4-dichlorophenyl)ethyl]imidazole

CAS 登录号 [24155-42-8]



相对分子质量 257.12

用途 益康唑的中间体。

参考文献 CA 116: P6537r, 20991r, 36154f/117; 48422a, 90211f, P131202z/118; 54344k/119; 19861d, 40212c/120; 217452e/122; 214008v/123; 254846u/124; P317159r, P343648u/125; P247819a。

生产单位 广东广州广东制药厂。

序号 18

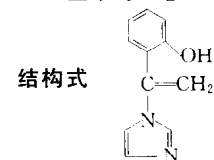
分子式 $C_{11}H_{10}N_2O$

化学名 1-[1-(2-羟基苯基)乙烯基]-1*H*-咪唑

异名 2-[1-(1*H*-咪唑-1-基)乙烯基]苯酚

英文名 1-[1-(2-hydroxyphenyl)ethenyl]-1*H*-imidazole, 2-[1-(1*H*-imidazol-1-yl)ethenyl]phenol

CAS 登录号 [74204-47-0]



相对分子质量 186.21

性质 结晶。m. p. 152.5~154 C。

制法 用咪唑、氯化亚硫酸、邻羟基苯乙酮在二氯甲烷中反应制得。

用途 氯康唑的中间体。

参考文献 CA 93: 46510q, 71640q/95; P43106t, P115557r; *J. Med. Chem.* 1983, 26: 768、中国医药工业杂志, 1992, 23 (3): 101。

生产单位 第二军医大学(上海)药学院试制。

序号 19

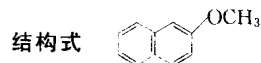
分子式 $C_{11}H_{10}O$

化学名 2-甲氧基萘

异名 2-萘甲醚

英文名 2-methoxynaphthalene, methyl 2-naphthyl ether, Nerolin

CAS 登录号 [93-04-9]



相对分子质量 158.20

性质 无色或白色片状结晶(乙醚)。m. p. 72°C。b. p. 274°C; 138°C/13.6kPa (100mmHg)。易溶于乙醚、氯仿、苯、二硫化碳, 微溶于乙醇, 不溶于水。

制法 可用β-萘酚与甲醇在硫酸参与下回流, 醚化得到本品。

用途 18-甲基炔诺酮、三烯高诺酮、萘普生的中间体。

参考文献 Beil 6; 640, Org. Synth. coll. vol. I. 1941, 59, 医药工业 1987, 18 (1): 1/1988, 19 (7): 289。

生产单位 上海五洲药业有限公司、山东淄博新华制药股份有限公司、江苏扬州制药厂、江苏南通制药厂、重庆西南第二制药厂、北京第三制药厂、内蒙古赤峰制药厂、广东广州何济公制药厂。

序号 20

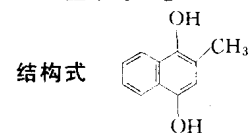
分子式 $C_{11}H_{10}O_2$

化学名 2-甲基-1,4-萘二酚

异名 2-甲基-1,4-萘氢醌

英文名 2-methyl-1,4-naphthalenediol, 2-methyl-1,4-naphthohydroquinone, 2-methyl-1,4-naphthoquinol, dihydrovitamin K₃

CAS 登录号 [481-85-6]



相对分子质量 174.20

性质 白色针状结晶(稀乙醇)。m. p. 168~170°C (181°C)。易溶于乙醇、丙酮, 略溶于氯仿、苯。

制法 可用2-甲基苯醌与1,3-丁二烯在乙酸参与下加热回流, 环合后得到本品。

用途 维生素K₃中间体。

参考文献 Ber. 1921, 54: 2912, J. Biol. Chem. 1939, 131: 375, J. Am. Chem. Soc. 1974, 96: 8046。

生产单位 安徽六安朝阳制药厂、上海申隆药业有限公司、江苏无锡县制药厂。

序号 21

分子式 $C_{11}H_{10}O_5$

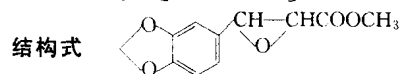
化学名 3-(苯并-1,3-二氧化杂环戊烯-5-基)-2,3-环氧丙酸甲酯

异名 3-(3,4-亚甲二氧苯基)-2,3-环氧丙酸甲酯

英文名 methyl 3-(benzodioxyl-5-yl) oxiranecarboxylate, methyl 3-(3,4-methylenedioxyphenyl)-2,3-epoxypropanoate, methyl 1,3-Benzodioxole-5-(α , β -

epoxy)propanoate

CAS 登录号 [39829-16-8]



相对分子质量 222.20

制法 用胡椒甲醛与氯乙酸甲酯在甲醇钠参与下缩合并环氧化制得。

用途 小蘗碱盐酸盐(盐酸黄连素)的中间体。

参考文献 CA 78: P84036n, P110913t/81: 91397w/83: 58368f/84: 17193x。

生产单位 辽宁沈阳东北制药总厂。

序号 22

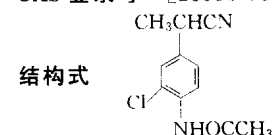
分子式 $C_{11}H_{11}ClN_2O$

化学名 2-(4-乙酰氨基-3-氯苯基)丙腈

异名 2'-氯-4'-(1-氰乙基)乙酰苯胺

英文名 2-(4-acetamino-3-chlorophenyl) propionitrile, 2'-chloro-4'-(1-cyanoethyl)acetanilide

CAS 登录号 [28581-73-9]



相对分子质量 222.68

性质 结晶。m. p. 81~82°C (74~75°C)。

制法 用苯乙腈以硫酸二甲酯甲基化, 生成2-苯基丙腈, 然后硝化、还原并乙酰化得2-(4-乙酰氨基苯基)丙腈, 最后以氯气氯化制得本品。

用途 吡咯芬的中间体。

参考文献 GB 1198212、中国医药工业杂志. 1991, 21 (7): 289。

生产单位 河南郑州大学化学系试制。

序号 23

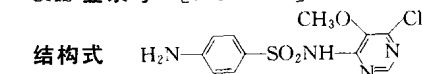
分子式 $C_{11}H_{11}ClN_4O_3S$

化学名 4-氨基-N-(6-氯-5-甲氧基-4-嘧啶基)苯磺酰胺

异名 6-氯-5-甲氧基-4-(磺胺基)嘧啶

英文名 4-amino-N-(6-chloro-5-methoxy-4-pyrimidinyl) benzenesulfonamide, 6-chloro-5-methoxy-4-(sulfanilamido)pyrimidine

CAS 登录号 [5018-23-5]



相对分子质量 314.75

制法 用甲氧基乙酸甲酯与草酸二乙酯在乙醇钠参与下缩合, 生成甲氧基丁酮二酸甲乙酯, 然后在减压下加

热脱羧基得甲氧基丙二酸甲乙酯，将后者与甲酰胺在甲醇钠参与下缩合，得5-甲氧基-4,6-二羟基嘧啶二钠，进而以盐酸中和，得5-甲氧基-4,6-二羟基嘧啶，再以三氯化磷氯化羟基，并与磺胺钠盐缩合制得本品。

用途 磺胺邻二甲氧嘧啶的中间体。

参考文献 CA 89: P24356j/90; P121635c/92; P58808k。

生产单位 上海三维制药有限公司、山东淄博新华制药股份有限公司、浙江杭州民生药业集团公司、广西桂林制药厂。

序号 24

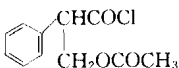
分子式 $C_{11}H_{11}ClO_3$

化学名 α -(乙酰氧基甲基)苯乙酰氯

异名 乙酰基苄苄酰氯、乙酰基托品酰氯

英文名 α -[(acetyloxy)methyl]benzeneacetyl chloride, acetyltropoyl chloride

CAS 登录号 [14510-37-3]; (±)型: [60372-15-8]

结构式 

相对分子质量 226.66

制法 用托品酸以乙酰氯酰化羟基，然后再以氯化亚砷使羧基形成酰氯制得本品。

用途 山莨菪碱氢溴酸盐的中间体。

参考文献 CA 97: 216529e/98; 215843m/99; 139724b/101; 43674u。

生产单位 浙江杭州民生药业集团公司、北京制药厂。

序号 25

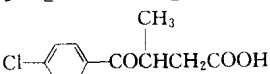
分子式 $C_{11}H_{11}ClO_3$

化学名 4-氯- β -甲基- γ -氧代苯丁酸

异名 3-(4-氯苯甲酰基)丁酸

英文名 4-chloro- β -methyl- γ -oxo-benzenebutanoic acid, 3-(4-chlorobenzoyl)butanoic acid

CAS 登录号 [52240-25-2]

结构式 

相对分子质量 226.66

性质 白色针状结晶。m. p. 82~83°C。

制法 用1-(α -溴代丙酰基)-4-氯苯与丙二酸二乙酯反应，生成2-羧基-3-(4-氯苯甲酰基)丁酸，将后者加热脱羧制得本品。

用途 匹莫苯的中间体。

参考文献 J. Am. Chem. Soc. 1960, 82: 3635、中国医药工业杂志. 1992, 23 (10): 466。

生产单位 四川成都华西医科大学药学院试制。

序号 26

分子式 $C_{11}H_{11}I_2NO_4$

化学名 2-(乙酰氨基)-3-(4-羟基-3,5-二碘苯基)丙酸

异名 N-乙酰基-3,5-二碘酪氨酸

英文名 2-(acetylamino)-3-(4-hydroxy-3,5-diiodophenyl) propanoic acid, N-acetyl-3,5-diiodotyrosine

CAS 登录号 [1027-28-7]

$CH_2CH(NHCOCH_3)COOH$

结构式 

相对分子质量 475.02

性质 结晶。m. p. 178~182°C。

制法 用酪氨酸先以碘和盐酸碘化，生成3,5-二碘酪氨酸，然后以乙酸酐酰化得到本品。

用途 三碘甲状腺原氨酸的中间体。

参考文献 CA 120: P154952v/125; 241626p, 248384s。

生产单位 上海淮海制药厂。

序号 27

分子式 $C_{11}H_{11}NO_2$

化学名 4-(2,3-环氧丙氧基)吲哚

异名 4-(环氧乙基甲氧基)吲哚

英文名 4-(2,3-epoxypropoxy) indole, 4-(oxiranyl-methoxy)indole

CAS 登录号 [35308-87-3]

结构式 

相对分子质量 189.21

制法 用4-羟基吲哚与环氧氯丙烷在碱参与下缩合制得。

用途 心得静的中间体。

参考文献 CA 125: P168021f, P275907w。

生产单位 河北石家庄制药厂。

序号 28

分子式 $C_{11}H_{11}NO_3$

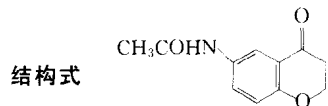
化学名 6-(乙酰氨基)-2,3-二氢-4H-1-苯并吡喃-4-酮

异名 N-(3,4-二氢-4-氧代-2H-1-苯并吡喃-7-基)乙酰胺

英文名 6-(acetylamino)-2,3-dihydro-4H-1-ben-

zopyran-4-one, *N*-(3,4-dihydro-4-oxo-2*H*-1-benzopyran-6-yl)acetamide

CAS 登录号 [103646-29-3]



相对分子质量 205.21

性质 结晶。m. p. 164~166 C。

制法 用对乙酰氨基苯酚与β-氯代丙酸缩合,生成β-(对乙酰氨基苯氧)丙酸,然后环合制得本品。

用途 醛糖还原酶抑制剂索比尼尔的中间体。

参考文献 CA 114: 101629q、中国医药工业杂志, 1990, 21 (5): 220。

生产单位 海军 411 医院药物研究中心(上海)试制。

序号 29

分子式 $C_{11}H_{11}NO_4$

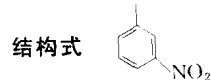
化学名 2-乙基-3-(3-硝基苯基)丙烯酸

异名 α-乙基间硝基肉桂酸、2-[(3-硝基苯基)亚甲基]丁酸

英文名 2-ethyl-3-(3-nitrophenyl)propenoic acid、α-ethyl-*m*-nitrocinnamic acid、2-[(3-nitrophenyl)methylene]butanoic acid

CAS 登录号 [5253-02-1]; E 型: [124525-55-9]

$CH=C(CH_2CH_3)COOH$



相对分子质量 221.21

性质 浅黄色结晶。m. p. 141~143 C。

制法 用间硝基苯甲醛与正丁酸酐加热反应制得。

用途 碘番酸的中间体。

参考文献 CA 101: P170895s/102; 5863t/103; P160544d/104; P88293x/112; 35744d。

生产单位 上海淮海制药厂、重庆西南第一制药厂、江苏金坛制药厂。

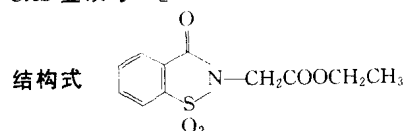
序号 30

分子式 $C_{11}H_{11}NO_5S$

化学名 2,3-二氢-3-氧代-1,2-苯并异噻唑-2-乙酸乙酯-1,1-二氧化物

英文名 ethyl 2,3-dihydro-3-oxo-1,2-benzisothiazole-2-acetate 1,1-dioxide

CAS 登录号 [24683-20-3]



相对分子质量 269.28

用途 吡罗昔康(类痛喜康)的中间体。

参考文献 CA 121: 83140m/124; 195392p/125; 86543p。

生产单位 河南开封制药厂。

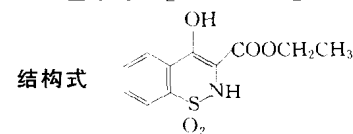
序号 31

分子式 $C_{11}H_{11}NO_5S$

化学名 4-羟基-2*H*-1,2-苯并噻嗪-3-羧酸乙酯-1,1-二氧化物

英文名 ethyl 4-hydroxy-2*H*-1,2-benzothiazine-3-carboxylate 1,1-dioxide

CAS 登录号 [24683-21-4]



相对分子质量 269.28

用途 吡罗昔康(炎痛喜康)的中间体。

参考文献 CA 120: 243976y; 121: 98811e。

生产单位 河南开封制药厂。

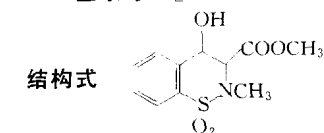
序号 32

分子式 $C_{11}H_{11}NO_5S$

化学名 4-羟基-2-甲基-2*H*-1,2-苯并噻嗪-3-羧酸甲酯-1,1-二氧化物

英文名 methyl 4-hydroxy-2-methyl-2*H*-1,2-benzothiazine-3-carboxylate 1,1-dioxide

CAS 登录号 [35511-15-0]



相对分子质量 269.28

用途 吡罗昔康(炎痛喜康)的中间体。

参考文献 CA 119: 49321v, 85419s/121: 98811e, P300907y/122; P105903n, P160662h/124: 360955r, 317092p/125; P247841b。

生产单位 上海第六制药厂。

序号 33

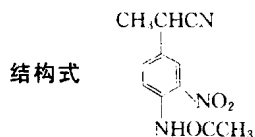
分子式 $C_{11}H_{11}N_3O_3$

化学名 2-[4-(乙酰氨基)-3-硝基苯基]丙腈

异名 *N*-[4-(1-氰基乙基)-2-硝基苯基]乙酰胺

英文名 2-[4-(acetamino) 3 nitrophenyl]propionitrile、*N*-[4-(1-cyanoethyl)-2-nitrophenyl]acetamide

CAS 登录号 [57555-89-2]



相对分子质量 233.23

性质 结晶。m. p. 144~145 C。

制法 用苯乙腈以硫酸二甲酯甲基化,生成2-苯基丙腈,然后以混酸硝化,并经还原及乙酰化得2-(4-乙酰氨基苯基)丙腈。将后者再以混酸硝化制得本品。

用途 氟吡洛芬的中间体。

参考文献 CA 84: 17279c、中国工业杂志, 1991, 21(1): 2。

生产单位 河南郑州大学化学系试制。

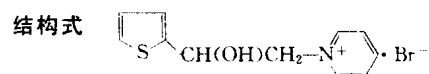
序号 34

分子式 $C_{11}H_{12}BrNOS$

化学名 1-[2-羟基-2-(2-噻吩基)乙基]溴化吡啶鎓

英文名 1-[2-hydroxy-2-(2-thienyl)ethyl]pyridinium bromide

CAS 登录号 [26031-81-2]



相对分子质量 286.19

性质 结晶。m. p. 228~230 C。

制法 用噻吩与乙酸酐在磷酸参与下酰化,生成2-乙酰基噻吩,然后以溴素在溴化亚铜作用下溴化得2-(溴代乙酰基)噻吩,将后者与吡啶成盐,并用钾硼氢还原碳基制得本品。

用途 噻乙吡啶的中间体。

参考文献 CA 72: 2509h。

生产单位 重庆西南第一制药厂。

序号 35

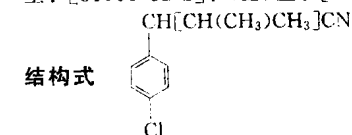
分子式 $C_{11}H_{17}ClN$

化学名 4-氯- α -(1-甲基乙基)苯乙腈

异名 α -(对氯苯基)- α -异丙基乙腈

英文名 4-chloro- α -(1-methylethyl) benzencetonitrile, α -(*p*-chlorophenyl)- α -isopropyl acetonitrile

CAS 登录号 [2012-81-9]、R 型: [81951-81-7]; S 型: [81951-82-2]、(±)型: [81951-76-0]



相对分子质量 193.68

用途 杀灭菊酯的中间体。

参考文献 CA 120:133982q, P216981q/123:27431m/124: 223248s, 260526b, R 型: CA 117: 68520j/121,

P81125m; S 型: CA 117/P68520j, 120: 163615q/121; 981125m; (±) 型: CA 117: P68520j/120, P6924y/121: P81125m/123: 5203u。

生产单位 上海中西药业股份有限公司。

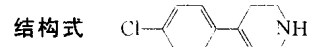
序号 36

分子式 $C_{11}H_{12}ClN$

化学名 4-(4-氯苯基)-1,2,3,6-四氢吡啶

英文名 4-(4-chlorophenyl)-1,2,3,6-tetrahydropyridine

CAS 登录号 [30005-48-4]、盐酸盐[51304-61-1]



相对分子质量 193.68

性质 b. p. 167~170 C/1kPa (8mmHg)。

制法 可用对二氯苯与丙酮在镁粉参与下加成,生成(4-氯苯基)二甲基甲醇氯化镁,然后水解得(4-氯苯基)二甲基甲醇,继而将后者在硫酸氢钾参与下减压加热脱水,得1-甲基-1-(4-氯苯基)乙烯,进而与甲醛、氯化铵环合即得本品。

用途 氟哌啶醇的中间体。

参考文献 J. Med. Chem. 1959, 1: 281、J. Pharm. Pharmacol. 1964, 16: 72。

生产单位 上海第十五制药厂、辽宁阜新市制药厂、陕西西安医药科研试验厂、山东济南医药科研所实验厂、山东红卫制药厂。

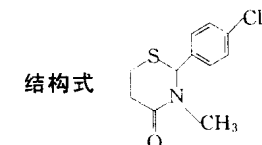
序号 37

分子式 $C_{11}H_{12}ClNOS$

化学名 2-(4-氯苯基)-3-甲基四氢-1,3-噻嗪-4-酮

英文名 2-(4-chlorophenyl)-3-methyltetrahydro-1,3-thiazine-4-one

CAS 登录号 [30897-26-8]



相对分子质量 241.74

制法 用对氯苯甲醛与甲胺缩合,生成对氯苯甲醛缩甲胺。将后者与巯基丙酸在减压下加热脱水环合制得本品。

用途 芬那露的中间体。

参考文献 CA 116: 128834f。

生产单位 辽宁沈阳东北第六制药厂。

序号 38

分子式 $C_{11}H_{12}ClNO_3$

化学名 4-(氯乙酰氨基)苯甲酸乙酯