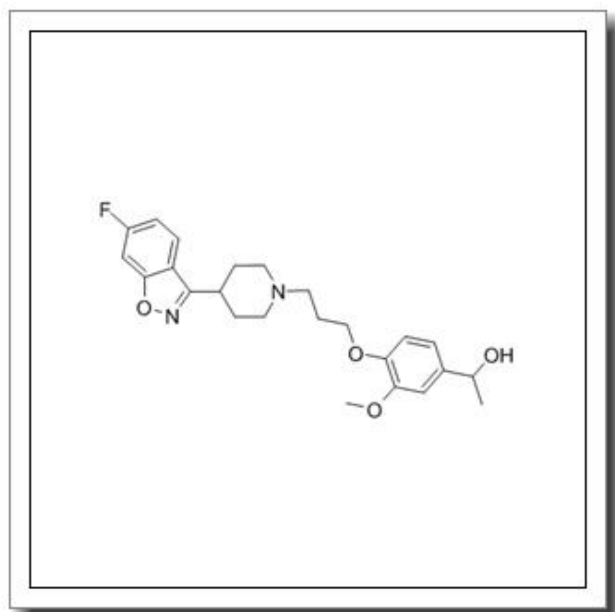


P88 伊潘立酮代谢物

1-[4-[3-[4-(6-fluoro-1,2-benzoxazol-3-yl)piperidin-1-yl]propoxy]-3-methoxyphenyl]ethanol



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-[4-[3-[4-(6-fluoro-1,2-benzoxazol-3-yl)piperidin-1-yl]propoxy]-3-methoxyphenyl]ethanol
中文名称	P88 伊潘立酮代谢物
CAS 号	133454-55-4
分子式	C ₂₄ H ₂₉ FN ₂ O ₄
分子量	428.496
纯度	≥ 96%

产品说明

1-[4-[3-[4-(6-fluoro-1,2-benzoxazol-3-yl)piperidin-1-yl]propoxy]-3-methoxyphenyl]ethanol (P88 伊潘立酮代谢物) 产品说明

1. 产品概述与化学特性

本产品为伊潘立酮 (Iloperidone) 的关键代谢中间体, 化学名称为 1-[4-[3-[4-(6-fluoro-1,2-benzoxazol-3-yl)piperidin-1-yl]propoxy]-3-methoxyphenyl]ethanol, CAS 号 133454-55-4, 分子式 C₂₄H₂₉FN₂O₄, 分子量 428.496。其纯度经 HPLC 验证 ≥96%, 为白色至类白色结晶粉末, 可溶于有机溶剂如 DMSO 和甲醇, 微溶于水。结构中的氟代苯并恶唑基团和哌啶环赋予其特定药理活性。

2. 生物化学功能与重要性

P88 是第二代抗精神病药物伊潘立酮在人体内的主要活性代谢产物之一, 通过拮抗多巴胺 D₂ 和 5-HT_{2A} 受体发挥调节中枢神经系统功能的作用。其代谢转化过程涉及肝脏 CYP 酶系, 对研究伊潘立酮的药效学、毒理学及个体化用药差异具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

该化合物主要用于以下领域:

1. 药物研发: 作为标准品用于伊潘立酮及其代谢物的定量分析与药代动力学研究;
2. 临床检测: 开发治疗药物监测 (TDM) 方法, 优化精神分裂症患者的给药方案;
3. 机理研究: 探索代谢产物与受体相互作用机制, 辅助新型抗精神病药物设计。

4. 储存条件与使用建议

建议避光密封保存于 -20℃ 干燥环境中, 长期储存需充惰性气体保护。使用时需在干燥氮气环境下操作, 避免反复冻融。溶解建议采用梯度稀释法, 推荐使用色谱级 DMSO 作为初始溶剂, 工作浓度需根据实验体系优化。

5. 质量控制与安全信息

本产品经质谱（MS）和核磁共振（NMR）验证结构，批次间纯度差异 $\leq 1\%$ 。操作时需佩戴防护手套及护目镜，避免吸入或皮肤接触。MSDS 数据显示其急性毒性较低，但仍建议在通风橱中处理废弃物需按危险化学品规范处置。如发生意外接触，立即用大量清水冲洗并就医。

注：本说明仅限科研用途，不适用于诊断或治疗人类疾病。