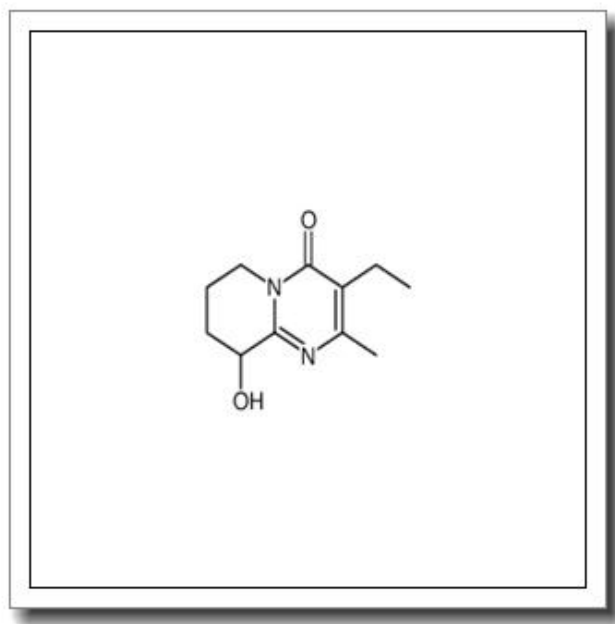


帕利哌酮相关物质 A

3-ethyl-9-hydroxy-2-methyl-6,7,8,9-tetrahydropyrido[1,2-a]pyrimidin-4-one



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-ethyl-9-hydroxy-2-methyl-6,7,8,9-tetrahydropyrido[1,2-a]pyrimidin-4-one
中文名称	帕利哌酮相关物质 A
CAS 号	849903-79-3
分子式	C ₁₁ H ₁₆ N ₂ O ₂
分子量	208.257
纯度	≥ 96%

产品说明

3-乙基-9-羟基-2-甲基-6,7,8,9-四氢吡啶并[1,2-a]嘧啶-4-酮（帕利哌酮相关物质 A）产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为帕利哌酮合成过程中的关键中间体或相关物质，化学名称为 3-ethyl-9-hydroxy-2-methyl-6,7,8,9-tetrahydropyrido[1,2-a]pyrimidin-4-one，分子式 C₁₁H₁₆N₂O₂，分子量 208.257，CAS 号 849903-79-3。其结构特征为吡啶并嘧啶酮骨架，含乙基、羟基及甲基取代基，赋予其特定极性和反应活性。常温下呈白色至类白色结晶性粉末，纯度 ≥96%（HPLC），符合医药中间体的质量控制标准。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为帕利哌酮（一种非典型抗精神病药）的合成前体或代谢关联物，其结构中的羟基和嘧啶酮基团可能参与受体结合或酶促反应。在药物研发中，其纯度与稳定性直接影响终产物的药理活性与安全性，因此对杂质控制和结构鉴定有严格要求。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于制药行业，具体用途包括：

- 帕利哌酮原料药生产中的工艺优化与质量控制
- 作为对照品用于药物杂质谱分析与方法验证
- 神经精神疾病治疗药物的机理研究与结构修饰
- 实验室规模合成其他吡啶并嘧啶酮类衍生物

4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中，避光、防潮，建议温度 2-8℃（长期）或 -20℃（长期稳定）。开封后需充惰性气体保护，避免反复冻融。使用时需在干燥环境下操作，佩戴防护手套及护目镜，避免吸入粉尘或接触皮肤。溶解性测试表明其易溶于有机溶剂如 DMSO、甲醇，水溶性较低，建议预实验确定溶剂体系。

5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC、NMR 及质谱表征，符合 USP/EP 杂质限度要求。安全数据表明：

- 潜在刺激性（皮肤接触后立即冲洗）
- 非已知致癌物，但需避免长期暴露
- 废弃物处理应遵循有机化学品规范

实验操作应在通风橱中进行，应急处理需备有活性炭吸附材料。详细毒理学数据参见随附的 MSDS 报告。

注：本说明仅限专业用途，不构成医疗建议。具体应用需结合实验目的进一步验证。