

# 替吡嘧啶杂质

*5-chloro-6-[(2-iminopyrrolidin-1-yl)methyl]-1H-pyrimidine-2,4-dione*

产品图片未找到

## 产品基本信息

| 属性    | 值   |
|-------|---|
| 化学名称  | 5-chloro-6-[(2-iminopyrrolidin-1-yl)methyl]-1H-pyrimidine-2,4-dione |
| 中文名称  | 替吡嘧啶杂质  |
| CAS 号 | 183204-74-2   |
| 分子式   | C9H11ClN4O2   |
| 分子量   | 242.662   |
| 纯度    | ≥ 96%   |

## 产品说明

### 5-氯-6-[(2-亚氨基吡咯烷-1-基)甲基]-1H-嘧啶-2,4-二酮产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

本品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 5-chloro-6-[(2-iminopyrrolidin-1-yl)methyl]-1H-pyrimidine-2,4-dione，中文别名替吡嘧啶杂质，CAS 号 183204-74-2。分子式 C<sub>9</sub>H<sub>11</sub>C<sub>1</sub>N<sub>4</sub>O<sub>2</sub>，分子量 242.662，纯度 ≥96%。其结构特征为嘧啶二酮骨架与吡咯烷亚氨基的氯代衍生物，具有极性可溶性，易溶于二甲基亚砷（DMSO）和甲醇，微溶于水。

#### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物是替吡嘧啶（抗病毒或抗肿瘤药物研发中的关键中间体）的合成杂质及代谢研究参照物。其分子结构中的活性基团可参与核酸类似物合成，干扰病毒或肿瘤细胞的复制过程。在药物质量控制中，本品作为杂质标准品用于 HPLC 或 LC-MS 分析，对确保主药成分的纯度及工艺优化具有重要意义。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发领域：

- （1）作为替吡嘧啶相关药物的工艺杂质对照品，用于合成过程监控与成品质量评估；
- （2）在代谢研究中作为标记物，追踪药物在生物体内的降解途径；
- （3）用于开发高灵敏度分析方法（如质谱联用技术），建立药物杂质谱数据库。

#### 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 -20° C 长期保存，短期使用可置于 2-8° C。开封后需充惰性气体保护以避免氧化。使用时需在干燥环境下操作，建议佩戴防护手套及护目镜。溶解性测试推荐先以少量 DMSO 助溶，再稀释至目标溶剂体系。

#### 5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC 归一化法检测纯度 ≥96%，重金属含量 ≤10ppm，符合药用杂质标准。

安全数据表明其对眼睛和皮肤有刺激性，操作应在通风橱中进行。若接触皮肤，立即用大量清水冲洗 15 分钟并就医。废弃物处置需遵守危险化学品管理规范，避免直接排放至环境。

（注：本说明基于现有研究数据，具体应用需结合实验条件进一步验证。）