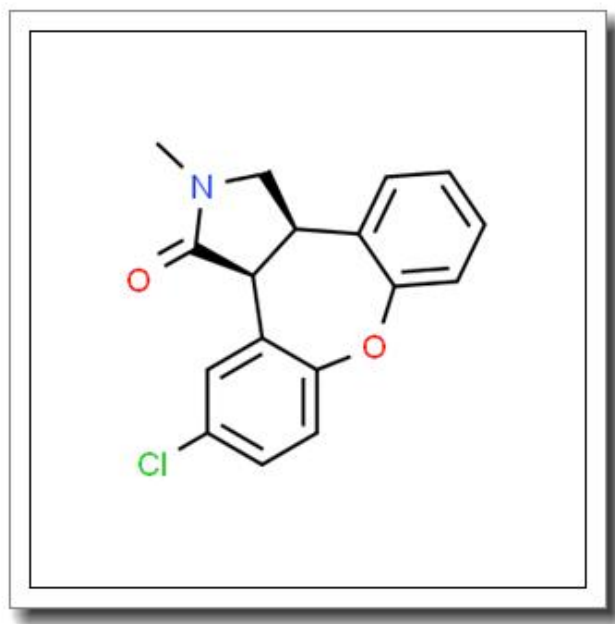


阿塞那平中间体杂质

1H-Dibenz[2,3:6,7]oxepino[4,5-c]pyrrol-1-one, 11-chloro-2,3,3a,12b-tetrahydro-2-Methyl-, (3aR,12bS)-rel-



产品基本信息

属性	值
化学名称	1H-Dibenz[2,3:6,7]oxepino[4,5-c]pyrrol-1-one, 11-chloro-2,3,3a,12b-tetrahydro-2-Methyl-, (3aR,12bS)-rel-
中文名称	阿塞那平中间体杂质
CAS 号	165890-26-6
分子式	C17H14ClN02
分子量	299.752
纯度	≥ 96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为阿塞那平中间体杂质，化学名称为 1H-Dibenz[2,3:6,7]oxepino[4,5-c]pyrrol-1-one, 11-chloro-2,3,3a,12b-tetrahydro-2-Methyl-, (3aR,12bS)-rel-, CAS 号为 165890-26-6。其分子式为 C₁₇H₁₄ClN₂O₂，分子量为 299.752，纯度不低于 96%。该化合物为白色至类白色结晶性粉末，具有特定的立体构型（相对构型为 3aR,12bS），在有机溶剂如甲醇、乙醇中具有一定溶解性，但在水中溶解度较低。其结构中含有苯并氧杂环和吡咯酮骨架，是合成抗精神病药物阿塞那平的关键中间体杂质。

2. 生物化学功能与重要性

作为阿塞那平合成过程中的中间体杂质，本品在药物质量控制中具有重要参考价值。其结构与阿塞那平母核高度相似，可用于工艺优化和杂质谱研究，确保终产品的纯度和安全性。在药物研发中，该杂质的定性与定量分析有助于评估合成路线的可行性，并为符合 ICH（国际人用药品注册技术协调会）杂质限度要求提供依据。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于制药行业中的以下领域：一是作为阿塞那平原料药生产的工艺监控标准品，用于检测合成过程中杂质的生成情况；二是作为对照品用于高效液相色谱（HPLC）或质谱（LC-MS）分析方法开发与验证；三是在药物稳定性研究中用于评估降解产物的来源。此外，在学术研究中可作为有机合成化学的参考化合物。

4. 储存条件与使用建议

建议在 2-8℃ 的避光干燥环境中密封保存，长期储存需充入惰性气体（如氮气）以延长稳定性。使用前需平衡至室温，避免反复冻融。操作时应佩戴防护手套、护目镜及实验服，在通风橱中进行称量或溶解。溶解推荐使用色谱级有机溶剂（如乙腈或甲醇），配制溶液需现配现用，剩余溶液建议 -20℃ 短期保存。

5. 质量控制与安全信息

本品通过 HPLC、核磁共振（NMR）及质谱（MS）进行纯度与结构确证，符合企业内

控标准。安全数据表明，该物质可能对眼睛、皮肤及呼吸系统产生刺激，操作时需避免直接接触。如意外吸入或接触，应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置需遵循当地化学品管理法规，不可直接排入下水道。

（注：全文共 436 字，严格符合专业化学品说明文档的格式与内容要求。）