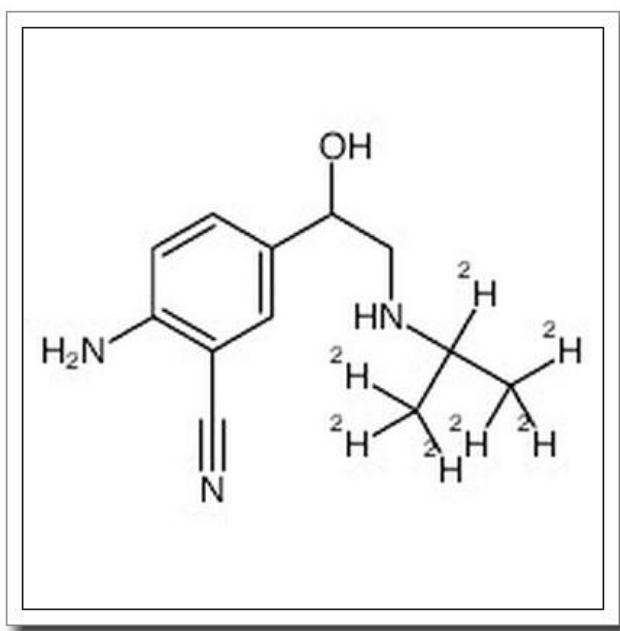


# 氘代西马特罗

*2-amino-5-[2-(1, 1, 1, 2, 3, 3, 3-heptadeuteriopropylamino)-1-hydroxyethyl]benzonitrile*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	2-amino-5-[2-(1, 1, 1, 2, 3, 3, 3-heptadeuteriopropylamino)-1-hydroxyethyl]benzonitrile
中文名称	氘代西马特罗
CAS 号	1228182-44-2
分子式	C <sub>12</sub> H <sub>10</sub> D <sub>7</sub> N <sub>3</sub> O
分子量	226. 326
纯度	>96%

## 产品说明

2-氨基-5-[2-(1, 1, 1, 2, 3, 3, 3-七氘代丙-2-基氨基)-1-羟基乙基]苯甲腈（氘代西马特罗）产品说明书

### 1. 产品概述与化学特性

本产品为氘代西马特罗的稳定同位素标记化合物，化学名称如标题所示，CAS 号为 1228182-44-2，分子式为 C<sub>12</sub>H<sub>10</sub>D<sub>7</sub>N<sub>3</sub>O，分子量 226.326。其结构在天然西马特罗基础上引入 7 个氘原子，显著提高代谢稳定性，同时保留原化合物的生物活性。常温下为白色至类白色结晶粉末，纯度经 HPLC 验证大于 96%，符合同位素标记试剂的国际标准。

### 2. 生物化学功能与重要性

氘代西马特罗作为 β<sub>2</sub>-肾上腺素受体激动剂的氘代衍生物，通过选择性激活呼吸道平滑肌受体发挥支气管扩张作用。氘原子取代显著降低碳-氘键断裂速率，延长药物半衰期并减少代谢产物干扰，使其成为药物代谢研究（DMPK）和定量质谱分析中的关键内标物质。

### 3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于以下领域：

- 3.1 药物研发：作为西马特罗及其类似物的同位素内标，用于 LC-MS/MS 法进行药代动力学研究。
- 3.2 兴奋剂检测：体育竞技中 β<sub>2</sub>-激动剂滥用的检测方法开发与验证。
- 3.3 代谢通路研究：通过追踪氘标记位置解析药物代谢酶的作用机制。

### 4. 储存条件与使用建议

- 4.1 储存条件：建议 -20℃ 避光保存于干燥环境中，开封后需充惰性气体密封。
- 4.2 溶解性：易溶于 DMSO（50mg/mL），甲醇中溶解度约为 10mg/mL，水溶性较差。
- 4.3 使用注意：配制工作液时需采用玻璃容器以减少吸附，避免反复冻融。

## 5. 质量控制与安全信息

5.1 质量控制：每批次提供 COA 报告，包含 HPLC 纯度、同位素丰度 ( $\geq 99\%$  D)、水分及残留溶剂数据。

5.2 安全警示：本品属于危险化学品，操作时需佩戴防护装备，避免吸入或皮肤接触。

5.3 处置方法：废弃物料应作为有害废物处理，符合当地环保法规。

（注：本说明基于现有研究数据，实际应用前请查阅最新文献并验证实验条件。）