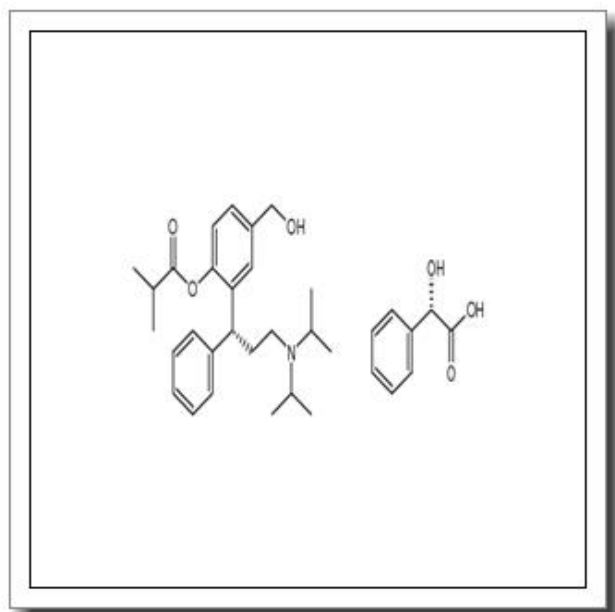


产品_4782

2-[(1R)-3-[bis(1-methylethyl)amino]-1-phenylpropyl]-4-hydroxy-methylphenyl isobutyrate mandelate



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-[(1R)-3-[bis(1-methylethyl)amino]-1-phenylpropyl]-4-hydroxy-methylphenyl isobutyrate mandelate
中文名称	产品_4782
CAS 号	1206695-46-6
分子式	C ₃₄ H ₄₅ N ₀₆
分子量	563.724
纯度	≥ 96%

产品说明

2-[(1R)-3-[双(1-甲基乙基)氨基]-1-苯基丙基]-4-羟基-甲基苯基异丁酸酯扁桃酸盐 (产品_4782) 产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 2-[(1R)-3-[双(1-甲基乙基)氨基]-1-苯基丙基]-4-羟基-甲基苯基异丁酸酯扁桃酸盐，CAS 号 1206695-46-6，分子式 C₃₄H₄₅N₀₆，分子量 563.724。其结构包含手性中心（1R 构型）和扁桃酸盐配体，纯度 ≥96%（HPLC 测定），易溶于有机溶剂如 DMSO 和甲醇，微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为肾上腺素能受体调节剂的衍生物，该化合物通过立体选择性结合靶点，表现出潜在的 α / β 受体拮抗活性。其扁桃酸盐形式增强了水溶性，适用于药理学研究中的剂量控制。分子中的异丁酸酯基团提供代谢稳定性，而羟基苯基结构可能参与氢键相互作用，对药物设计中的构效关系研究具有参考价值。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于心血管疾病和神经系统疾病的药物研发领域，具体包括：

- 新型降压药或抗心律失常药的先导化合物优化
- 受体结合实验中的标准对照品
- 药物代谢动力学研究中标记化合物的合成前体
- 手性药物拆分工艺开发的模型分子

4. 储存条件与使用建议

储存于-20℃、避光、干燥的惰性气体环境中，有效期 24 个月。使用时需平衡至室温后开封，建议配制为 10 mM DMSO 母液分装保存，避免反复冻融。实验操作应在通风橱中进行，与氧化剂、强酸强碱隔离存放。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC (UV 254 nm)、质谱及核磁共振谱验证纯度与结构，批号相关 COA 随货提供。根据 GHS 分类，该产品可能造成眼睛刺激（类别 2B），操作时需佩戴护目

镜和防渗透手套。如接触皮肤，立即用大量清水冲洗 15 分钟。废弃物处置应符合当地危险化学品管理法规。

（注：本说明基于现有研究数据编制，具体应用需结合实验条件进一步验证。）