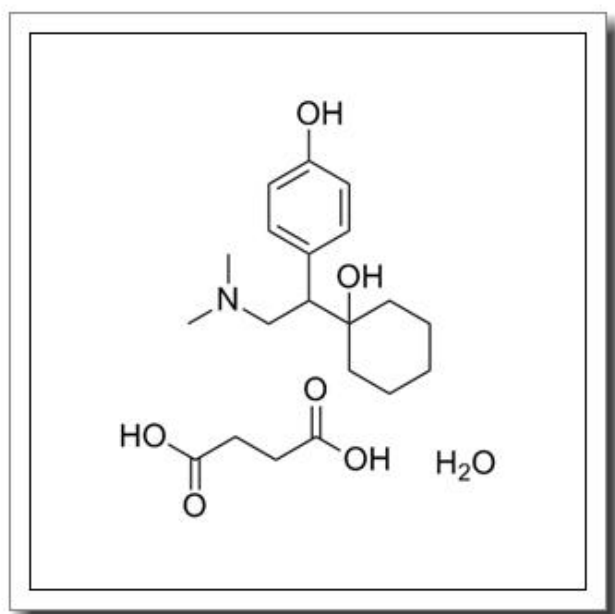


琥珀酸去甲文拉法辛

[2-(1-hydroxycyclohexyl)-2-(4-hydroxyphenyl)ethyl]dimethylammonium 3-carboxypropanoate monohydrate



产品基本信息

属性	值
化学名称	[2-(1-hydroxycyclohexyl)-2-(4-hydroxyphenyl)ethyl]dimethylammonium 3-carboxypropanoate monohydrate
中文名称	琥珀酸去甲文拉法辛
CAS 号	386750-22-7
分子式	C ₂₀ H ₃₃ N ₀₇
分子量	399.48
纯度	≥ 96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

琥珀酸去甲文拉法辛 ([2-(1-hydroxycyclohexyl)-2-(4-hydroxyphenyl)ethyl]dimethylammonium 3-carboxypropanoate monohydrate) 是一种有机化合物, CAS 号为 386750-22-7, 分子式为 C₂₀H₃₃N₀₇, 分子量为 399.48。该化合物为白色或类白色结晶性粉末, 纯度≥96%, 含有一分子结晶水。其结构结合了羟基环己基、羟苯基和二甲基铵基团, 并通过羧酸丙酸酯键形成稳定的盐形式。该物质易溶于水、甲醇等极性溶剂, 在酸性或中性条件下稳定, 但在强碱性环境中可能发生水解。

2. 生物化学功能与重要性

琥珀酸去甲文拉法辛是文拉法辛 (一种 5-羟色胺和去甲肾上腺素再摄取抑制剂) 的关键代谢产物之一, 具有类似的药理活性。它通过调节中枢神经系统单胺类神经递质的再摄取, 影响情绪和认知功能。其独特的羧酸酯结构增强了水溶性, 有利于生物利用度的提升, 因此在神经药理学研究中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

该化合物主要用于医药研发领域, 特别是抗抑郁药物及其代谢机制的研究。具体用途包括: 作为标准品用于 HPLC 或 LC-MS 分析, 定量检测生物样本中的去甲文拉法辛浓度; 作为对照品评估药物代谢动力学; 在体外实验中用于探究代谢酶 (如 CYP2D6) 的活性。此外, 它还可用于神经科学基础研究, 如单胺类递质转运体的功能分析。

4. 储存条件与使用建议

建议在 2-8℃ 避光干燥条件下储存, 长期保存需置于惰性气体环境中。开封后需密封防潮, 避免反复冻融。使用时需佩戴防护手套和护目镜, 在通风橱中操作。溶解建议使用纯水或缓冲盐溶液, 避免与强氧化剂或强碱接触。实验废液应按照危险化学品规范处置。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC、NMR 和质谱进行严格质量控制，确保纯度 $\geq 96\%$ 。安全数据表明，其急性毒性较低（LD50 未明确），但可能对眼睛和皮肤产生轻微刺激。安全术语提示：避免吸入粉尘（S22），接触后立即冲洗（S28）。运输分类为非危险品，但需符合一般化学品运输规范。研究人员应查阅最新版 MSDS 并遵守实验室安全规程。