



上海源叶生物科技有限公司
Shanghai yuanye Bio-Technology Co., Ltd
电话: 021-61312973 传真: 021-55068248
网址: www.shyuanye.com
邮箱: shyyysw@sina.com

产品名称: **Batefenterol**
CAS 号: **743461-65-6**
产品货号: **S86382**

生物活性:

Description	Batefenterol (GSK961081;TD-5959)是一种新的 muscarinic 受体拮抗剂和 β 2-肾上腺素受体激动剂; 对 hM2, hM3 和 β 2-肾上腺素受体有高亲和力, Ki 值分别为 1.4, 1.3 和 3.7nM。				
IC50 & Target	mAChR2	mAChR3			
In Vitro	Batefenterol 是一种新型的 first-in-class 吸入型双功能化合物, 同时具有毒蕈碱拮抗剂 (MA) 和 β 2-肾上腺素能受体激动剂 (BA) 特性 (MABA)。在人类重组受体的竞争性放射性配体结合研究中, Batefenterol 对 hM2 (Ki=1.4 nM)、hM3 毒蕈碱受体 (Ki=1.3 nM) 和 h β 表现出高亲和力 2-肾上腺素能受体 (Ki=3.7 nM)。Batefenterol 是一种有效的 h β 2-肾上腺素能受体激动剂 (EC50=0.29 nM, 用于刺激 cAMP 水平), 功能选择性比 h β 高 440 倍和 320 倍 1-和 h β 3-肾上腺素能受体[1]。				
In Vivo	在豚鼠支气管保护试验中, 吸入 Batefenterol 通过 MA (ED50=33.9 μ g/mL)、BA (ED50= 14.1 μ g/mL) 和 MABA (ED50=6.4 μ g/mL) 机制。给药后长达 7 天, Batefenterol 通过 MA、BA 和 MABA 机制对豚鼠显著的支气管保护作用很明显[1]。在表达天然毒蕈碱 M3 和 β 2 的豚鼠离体气管中, Batefenterol 通过涉及 M3 受体竞争性拮抗的双重机制产生平滑肌松弛 (EC50=50 nM) 和 β 2 受体的激动作用 (EC50=25 nM)。对毒蕈碱受体和 β 2 受体的联合作用比单独作用任何一种功能更有效 (EC50=10 nM)。Batefenterol 具有快速的清除率和较短的半衰期[2]。				
Solvent&Solubility	细胞实验: DMSO 中的溶解度 : ≥ 100 mg/mL (135.09 mM; 吸湿的 DMSO 对产品的溶解度有显著影响, 请使用新开封的 DMSO) * "≥" means soluble, but saturation unknown				
		SolventMassConcentration	1 mg	5 mg	10 mg
	Preparing	1 mM	1.3509 mL	6.7546 mL	13.5091 mL
	Stock Solutions	5 mM	0.2702 mL	1.3509 mL	2.7018 mL
		10 mM	0.1351 mL	0.6755 mL	1.3509 mL
*请根据产品在不同溶剂中的溶解度选择合适的溶剂配制储备液; 一旦配成溶液, 请分装保存, 避免反复冻融造成的产品失效。 储备液的保存方式和期限: -80°C, 2 years; -20°C, 1 year。-80°C 储存时, 请在 2 年内使用, -20°C 储存时, 请在 1 年内使用。 动物实验: 请根据您的 实验动物和给药方式 选择适当的溶解方案。 以下溶解方案都请先按照 In Vitro 方式配制澄清的储备液, 再依次添加助溶剂: ——为保证实验结果的可靠性, 澄清的储备液可以根据储存条件, 适当保存; 体内实验的工作液, 建议您现用现配, 当天使用; 以下溶剂前显示的百分比是指该溶剂在您配制终溶液中的体积占比; 如在配制过程中出现沉淀、析出现象, 可以通过加热和/或超声的方式助溶 方案 一 请依序添加每种溶剂: 10% DMSO → 40% PEG300 → 5% Tween-80 → 45% Saline Solubility: ≥ 2.5 mg/mL (3.38 mM); 澄清溶液 此方案可获得 ≥ 2.5 mg/mL (饱和度未知) 的澄清溶液。					



	以 1 mL 工作液为例, 取 100 μL 25.0 mg/mL 的澄清 DMSO 储备液加到 400 μL PEG300 中, 混合均匀; 再向上述体系中加入 50 μL Tween-80, 混合均匀; 然后再继续加入 450 μL 生理盐水 定容至 1 mL。 生理盐水的配制: 将 0.9 g 氯化钠, 溶解于 ddH₂O 并定容至 100 mL, 可以得到澄清透明的生理盐水溶液。 方案 二 请依序添加每种溶剂: 10% DMSO $\rightarrow$ 90% Corn Oil Solubility: $\geq$ 2.5 mg/mL (3.38 mM); 澄清溶液 此方案可获得 $\geq$ 2.5 mg/mL (饱和度未知) 的澄清溶液, 此方案实验周期在半个月以上的动物实验酌情使用。 以 1 mL 工作液为例, 取 100 μL 25.0 mg/mL 的澄清 DMSO 储备液加到 900 μL 玉米油中, 混合均匀。				
参考文献	[1]. Hegde SS, et al. Pharmacologic characterization of GSK-961081 (TD-5959), a first-in-class inhaled bifunctional bronchodilator possessing muscarinic receptor antagonist and β 2-adrenoceptor agonist properties. J Pharmacol Exp Ther. 2014 Oct;351(1):190-9. [2]. Hughes AD, et al. Discovery of (R)-1-(3-((2-chloro-4-(((2-hydroxy-2-(8-hydroxy-2-oxo-1,2-dihydroquinolin-5-yl)ethyl)amino)methyl)-5-methoxyphenyl)amino)-3-oxopropyl)piperidin-4-yl [1,1'-biphenyl]-2-ylcarbamate (TD-5959, GSK961081, batenfenterol): first-in-class dual pharmacology multivalent muscarinic antagonist and β ? agonist (MABA) for the treatment of chronic obstructive pulmonary disease (COPD). J Med Chem. 2015 Mar 26;58(6):2609-22.				
完整储备液配制表: 请根据产品在不同溶剂中的溶解度选择合适的溶剂配制储备液; 一旦配成溶液, 请分装保存, 避免反复冻融造成的产品失效。 储备液的保存方式和期限: -80°C, 2 years; -20°C, 1 year。 -80°C 储存时, 请在 2 年内使用, -20°C 储存时, 请在 1 年内使用。					
可选溶剂	质量 溶剂体积 浓度	1 mg	5 mg	10 mg	25 mg
DMSO	1 mM	1.3509 mL	6.7546 mL	13.5091 mL	33.7728 mL
	5 mM	0.2702 mL	1.3509 mL	2.7018 mL	6.7546 mL
	10 mM	0.1351 mL	0.6755 mL	1.3509 mL	3.3773 mL
	15 mM	0.0901 mL	0.4503 mL	0.9006 mL	2.2515 mL
	20 mM	0.0675 mL	0.3377 mL	0.6755 mL	1.6886 mL
	25 mM	0.0540 mL	0.2702 mL	0.5404 mL	1.3509 mL
	30 mM	0.0450 mL	0.2252 mL	0.4503 mL	1.1258 mL
	40 mM	0.0338 mL	0.1689 mL	0.3377 mL	0.8443 mL
	50 mM	0.0270 mL	0.1351 mL	0.2702 mL	0.6755 mL
	60 mM	0.0225 mL	0.1126 mL	0.2252 mL	0.5629 mL



上海源叶生物科技有限公司
Shanghai yuanye Bio-Technology Co., Ltd
电话: 021-61312973 传真: 021-55068248
网址: www.shyuanye.com
邮箱: shyyssw@sina.com

	80 mM	0.0169 mL	0.0844 mL	0.1689 mL	0.4222 mL
	100 mM	0.0135 mL	0.0675 mL	0.1351 mL	0.3377 mL



源叶