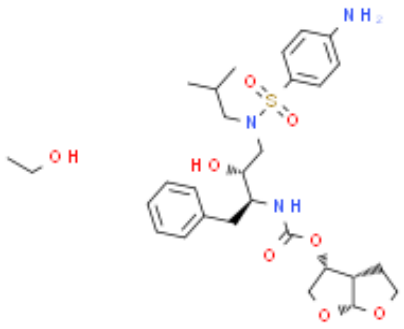
Product Data Sheet

Cas No.:	635728-49-3	Cat. No:	PC15733
Product Name:	地瑞那韦乙醇盐.		
Product synonym:	地瑞那韦乙醇盐;地瑞那韦乙醇合物;达芦那韦乙醇;达芦那韦乙醇合物;地瑞那韦;瑞拉韦乙醇标准品		
Chemical name:	地瑞那韦乙醇盐.		
MF:	C29H43N3O8S	FW:	593.7320
Purity:	≥98%	Batch No.:	-
Storage:			
Structural formula:			
λmax:	-	Formulation:	-
Solubility :			
SMILES :	S(C1C([H])=C([H])C(=C([H])C=1[H])N([H])[H])(N(C([H])([H])C([H])(C([H])([H])[H])C([H])([H])[H])C([H])([H])[C@]([H])([C@]([H])(C([H])([H])C1C([H])=C([H])C([H])=C([H])C=1[H])N([H])C(=O)O[C@@]1([H])C([H])([H])O[C@]2([H])[C@@]1([H])C([H])([H])C([H])([H])O2)O[H])(=O)=O.O([H])C([H])([H])C([H])([H])[H]		
InChI Code:	-		
InChI Key:			
WARNING This product is not for human or veterinary use.			

Product Description

635728-49-3，地瑞那韦乙醇盐，Darunavir Ethanolate，Medlife，上海现货。 Medlife，致力于提供高品质、高性价比小分子化合物的产品。 Medlife小分子化合物大量库存，提供超过2万种的抑制剂、激动剂、拮抗剂等产品，是药物及疾病研究的重要原料供应商。 非肽HIV蛋白酶抑制剂，Darunavir ethanolate (TMC114 ethanolate) 是一种用于治疗和预防HIV/AIDS的HIV蛋白酶抑制剂。对野生型HIV-1蛋白酶的Ki值为1 nM。 查询关键词:“635728-49-3，地瑞那韦乙醇盐，Darunavir Ethanolate，PC15733，Medlife，上海现货”。

生物活性	Darunavir ethanolate (TMC114 Ethanolate) is a potent **HIV** protease inhibitor used to treat and prevent HIV/AIDS. Darunavir has a K_i of 1 nM for wild type HIV-1 protease.

IC50 & Target[1][2]	HIV-1
体外研究(In Vitro)	Darunavir is a broad-spectrum potent inhibitor active against HIV-1 clinical isolates with minimal cytotoxicity. Darunavir forms hydrogen bonds with the conserved main-chain atoms of Asp29 and Asp30 of the protease. These interactions are proposed to be critical for the potency of this compound against HIV isolates that are resistant to multiple protease inhibitors. In an *体外研究* study in MT-2 cells, the potency of darunavir is greater than that of saquinavir, amprenavir, nelfinavir, indinavir, lopinavir and ritonavir. Darunavir is primarily metabolized by the hepatic cytochrome P450 (CYP) enzymes, primarily CYP3A. The 'boosting' dose of ritonavir acts an an inhibitor of CYP3A, thereby increasing darunavir bioavailability. **Medlife has not independently confirmed the accuracy of these methods. They are for reference only.**
体内研究(In Vivo)	Darunavir is effective against wild-type and PI-resistant HIV, and has an oral bioavailability of 37%. It needs to be combined with ritonavir, which increases the bioavailability to 82%. **Medlife has not independently confirmed the accuracy of these methods. They are for reference only.**
包装储存	Powder **-20°C** 3 years **4°C** 2 years In solvent **-80°C** 6 months **-20°C** 1 month
溶解度数据	*体外研究:* **DMSO : ≥ 50 mg/mL (84.21 mM)** * "≥" means soluble, but saturation unknown.

配制储备溶液	溶剂体积 / 质量 / 浓度	1 mg	5 mg	10 mg
	1 mM	1.6843 mL	8.4213 mL	16.8427 mL
	5 mM	0.3369 mL	1.6843 mL	3.3685 mL
	10 mM	0.1684 mL	0.8421 mL	1.6843 mL

* 产品不同，其溶解度不同。建议根据产品选择合适的溶剂配制储备溶液；配成溶液后，**建议分装保存，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, 6 months; -20°C, 1 month。-80°C 储存时，建议在 6 个月内使用，-20°C 储存时，建议在 1 个月内使用。

体内研究:

建议根据您的实验动物和给药方式选择适当的溶解方案。以下溶解方案都建议先按照 **体外研究** 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**

1. 建议依照次序添加每种溶剂： 10% DMSO 40% PEG300 5% Tween-80 45% saline

   Solubility: ≥ 2.5 mg/mL (4.21 mM); Clear solution

   此方案可获得 ≥ 2.5 mg/mL (4.21 mM，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；向上述体系中加入50 μL Tween-80，混合均匀；然后继续加入 450 μL生理盐水定容至 1 mL。

   将 0.9 g 氯化钠，完全溶解于 100 mL ddH?O 中，得到澄清透明的生理盐水溶液

2. 建议依照次序添加每种溶剂： 10% DMSO 90% (20% SBE-β-CD in saline)

   Solubility: ≥ 2.5 mg/mL (4.21 mM); Clear solution

   此方案可获得 ≥ 2.5 mg/mL (4.21 mM，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 900 μL 20% 的 SBE-β-CD 生理盐水水溶液中，混合均匀。

   将 2 g 磺丁基醚 β-环糊精加入 5 mL 生理盐水中，再用生理盐水定容至 10 mL，完全溶解，澄清透明

3. 建议依照次序添加每种溶剂： 10% DMSO 90% corn oil

   Solubility: ≥ 2.5 mg/mL (4.21 mM); Clear solution

   此方案可获得 ≥ 2.5 mg/mL (4.21 mM，饱和度未知) 的澄清溶液，此方案不适用于实验周期在半个月以上的实验。

   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。

*