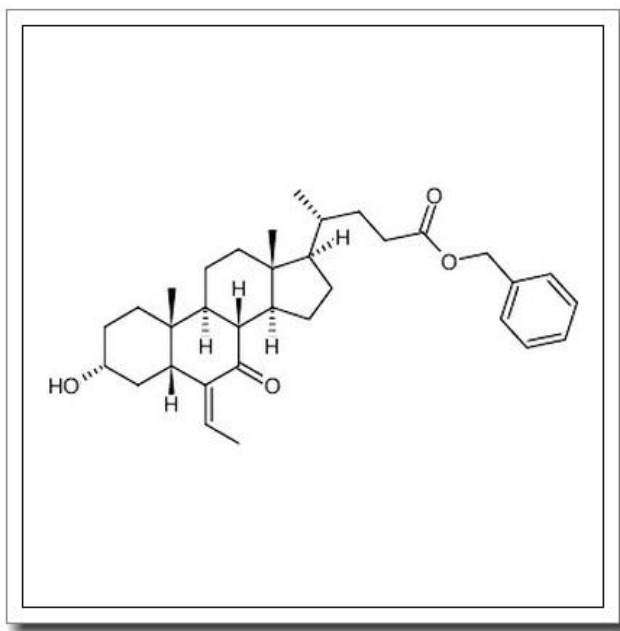


(3Alpha,5Beta)-6-甲基乙烯基-3-羟基-7-氧-胆烷酸苄酯

benzyl 3 α -hydroxy-6-ethylidene-7-keto-5 β -cholan-24-oate



产品基本信息

属性	值
化学名称	benzyl 3 α -hydroxy-6-ethylidene-7-keto-5 β -cholan-24-oate
中文名称	(3Alpha, 5Beta)-6-甲基乙烯基-3-羟基-7-氧-胆烷酸苄酯
CAS 号	1352328-66-5
分子式	C33H46O4
分子量	506.716
纯度	>96%

产品说明

以下是符合要求的专业产品说明:

产品名称: (3 α , 5 β)-6-甲基乙烯基-3-羟基-7-氧-胆烷酸苄酯 (benzyl 3 α -hydroxy-6-ethylidene-7-keto-5 β -cholane-24-oate)

1. 产品概述与化学特性

本产品是一种高纯度胆汁酸衍生物, 化学式为 C₃₃H₄₆O₄, 分子量 506.716, CAS 号为 1352328-66-5。该化合物属于修饰型胆烷酸酯类, 结构中包含特征性的 3 α -羟基、7-酮基以及 6-位乙叉基团, 苄酯的引入显著提高了其脂溶性。常温下为白色至类白色结晶性粉末, 纯度经 HPLC 验证 $\geq 96\%$ 。

2. 生物化学功能与重要性

作为胆汁酸的结构类似物, 该化合物能够特异性结合法尼醇 X 受体 (FXR) 和 G 蛋白偶联胆汁酸受体 (TGR5), 在胆固醇代谢调控和胆汁酸信号转导中起关键作用。其独特的 6-乙叉基团赋予分子更强的受体选择性和代谢稳定性, 是研究胆汁酸相关通路的重要分子工具。

3. 主要应用领域与具体用途

- 3.1 药物研发: 作为 FXR/TGR5 双靶点激动剂的先导化合物, 用于代谢性疾病 (如非酒精性脂肪肝、糖尿病) 的新药开发
- 3.2 基础研究: 用于构建胆汁酸信号通路的体外模型, 研究肠道菌群-肝脏轴调控机制
- 3.3 诊断试剂: 作为 HPLC/MS 检测内源性胆汁酸的定量参照标准品
- 3.4 生物标记物: 用于追踪胆汁酸转运体 (如 ASBT、NTCP) 的功能活性

4. 储存条件与使用建议

推荐-20 $^{\circ}$ C 避光保存于原装容器中, 干燥环境下可稳定保存 24 个月。使用前需平衡至室温并避免反复冻融。溶解建议采用无水 DMSO (浓度 ≤ 10 mM) 或乙醇溶液, 水溶液需现配现用。实验操作应在通风橱中进行。

5. 质量控制与安全信息

批次质检报告包含 HPLC 纯度 ($\geq 96\%$)、LC-MS 结构验证及水分含量 ($\leq 0.5\%$) 数据。该化合物属于刺激性化学品, 操作时需佩戴防护手套和护目镜。如接触皮肤, 立即用大量清水冲洗 15 分钟。废弃物处置应遵守当地危险化学品处理法规。