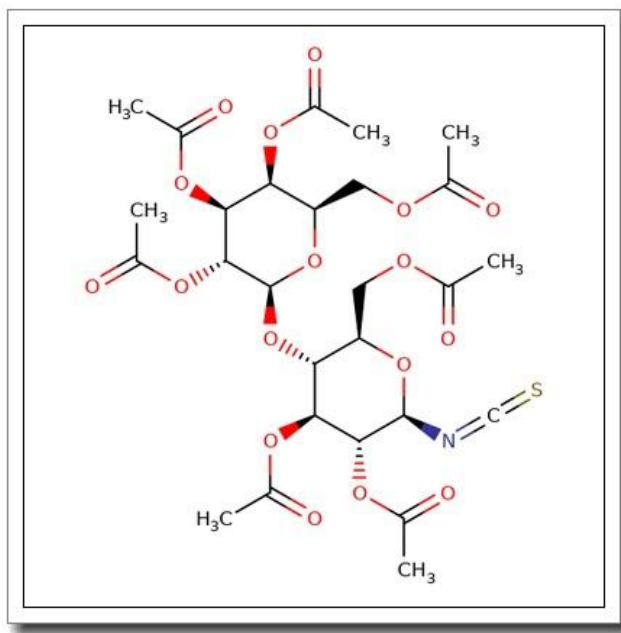


2,3,6,2',3',4',6'-Hepta-O-acetyl-b-D-lactosyl isothiocyanate



产品基本信息

属性	值
化学名称	2,3,6,2',3',4',6'-Hepta-O-acetyl-b-D-lactosyl isothiocyanate
产品目录号	BGGCB-0412
CAS 号	77489-36-2
分子式	C ₂₇ H ₃₅ N ₀ S ₁
分子量	677.64 g/mol
纯度	>96%

产品说明

2, 3, 6, 2', 3', 4', 6'-七-O-乙酰基-β-D-乳糖基异硫氰酸酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为高纯度糖基化异硫氰酸酯衍生物，化学名称 2, 3, 6, 2', 3', 4', 6'-Hepta-O-acetyl-β-D-lactosyl isothiocyanate, CAS 号 77489-36-2, 分子式 C₂₇H₃₅N₀₁S, 分子量 677.64 g/mol。其结构特征为乳糖骨架经全乙酰化修饰后与异硫氰酸酯基团偶联，形成具有高反应活性的糖苷化合物。产品为白色至类白色结晶性粉末，纯度经 HPLC 验证 >96%，易溶于二甲基亚砜（DMSO）、氯仿等有机溶剂，在酸性或碱性条件下易发生水解。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为糖化学修饰的关键中间体，其异硫氰酸酯基团（-N=C=S）可与氨基（-NH₂）发生特异性缩合反应，广泛应用于糖蛋白、糖脂等生物大分子的标记与结构改造。乙酰基保护策略显著增强了糖苷键的稳定性，使其在寡糖合成中成为重要的“糖基供体”。在糖生物学研究中，其独特结构可模拟天然糖链的乙酰化修饰状态，为糖基化修饰机制研究提供工具分子。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于以下领域：

- 3.1 糖化学合成：作为糖基化试剂用于构建复杂寡糖链，特别是含 β-糖苷键的乳糖衍生物。
- 3.2 生物偶联：通过异硫氰酸酯基团与抗体、凝集素等蛋白质的伯氨基结合，制备糖探针或亲和色谱配体。
- 3.3 药物开发：用于糖基化前药设计，改善药物溶解性或靶向性。
- 3.4 糖组学研究：作为标准品用于质谱法鉴定乙酰化糖链结构。

4. 储存条件与使用建议

储存条件：需避光密封保存于-20℃干燥环境中，长期储存建议充入惰性气体。开封后建议分装使用以避免反复冻融。

使用建议：溶解时优先选用无水 DMSO（浓度 ≤ 10 mM），避免接触水或醇类溶剂。
反应体系需严格除水，建议在氮气保护下进行偶联反应。

5. 质量控制与安全信息

质量控制：批次纯度经 HPLC（C18 柱，乙腈/水梯度洗脱）检测，残留溶剂符合 ICH 标准。核磁共振（ ^1H NMR、 ^{13}C NMR）与质谱（HRMS）数据备索。

安全信息：本品对眼睛、皮肤有刺激性，操作时需佩戴防护手套及护目镜。MSDS 显示其半数致死量（小鼠经口） $\text{LD}_{50} > 500$ mg/kg，属于低毒类化合物，但吸入粉尘可能引发呼吸道不适。废弃物处置需遵守有机溶剂处理规范。

（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优化。更多技术参数可联系技术支持获取。）