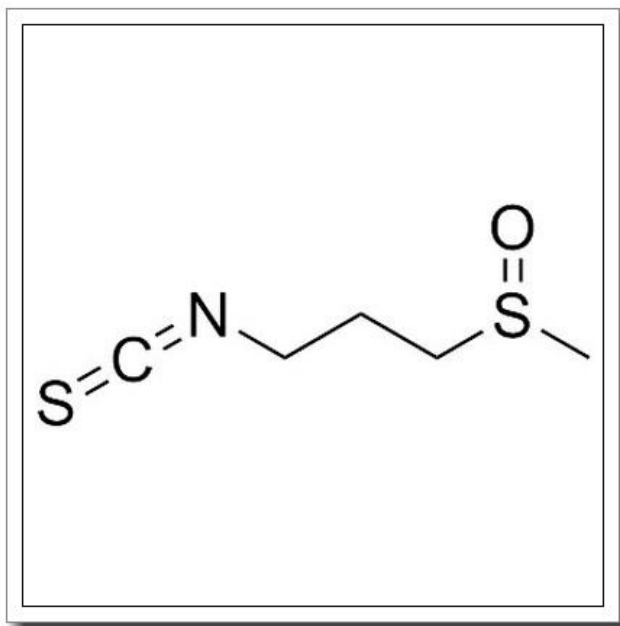


# Iberin

*1-isothiocyanato-3-methylsulfinylpropane*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	1-isothiocyanato-3-methylsulfinylpropane
中文名称	Iberin
CAS 号	505-44-2
分子式	C <sub>5</sub> H <sub>9</sub> NOS <sub>2</sub>
分子量	163. 261
纯度	>96%

## 产品说明

### 1. 产品概述与化学特性

Iberin (1-异硫氰酸基-3-甲亚磺酰基丙烷) 是一种含硫有机化合物, 化学式为  $C_5H_9NOS_2$ , 分子量为 163.261, CAS 号为 505-44-2。该化合物为无色至淡黄色液体, 具有特征性刺激性气味, 纯度通常高于 96%。其结构中同时包含异硫氰酸酯 ( $-N=C=S$ ) 和甲亚磺酰基 ( $-S(=O)-CH_3$ ) 官能团, 赋予其独特的化学反应性和生物活性。Iberin 易溶于有机溶剂如乙醇、二甲基亚砷 (DMSO), 但在水中溶解度较低。

### 2. 生物化学功能与重要性

Iberin 是十字花科植物中天然存在的芥子油苷水解产物, 属于硫代葡萄糖苷衍生物家族。在生物体内, 它通过激活 Nrf2/ARE 信号通路发挥抗氧化作用, 并能诱导 II 相解毒酶的表达。研究表明, Iberin 具有显著的抗炎、抗癌和细胞保护活性, 尤其在调控肿瘤细胞凋亡和抑制 NF- $\kappa$ B 通路方面表现突出。其生物活性与其分子中的异硫氰酸酯基团密切相关, 该基团可与蛋白质的巯基发生共价修饰。

### 3. 主要应用领域与具体用途

Iberin 广泛应用于生物医学研究和药物开发领域。在基础研究中, 它常作为 Nrf2 通路的激活剂, 用于研究氧化应激和细胞防御机制。在肿瘤学研究中, Iberin 被用于探究其对多种癌细胞 (如乳腺癌、结肠癌) 的增殖抑制效应。此外, 该化合物还可作为食品科学领域的天然防腐剂研究对象, 或用于开发功能性食品添加剂。

### 4. 储存条件与使用建议

本品需避光保存于  $-20^{\circ}C$  的干燥环境中, 长期储存建议充入惰性气体保护。开封后应尽快使用, 避免反复冻融。使用时需在通风橱中操作, 佩戴防护手套和护目镜。建议用 DMSO 配制母液 (浓度不超过 100mM), 工作浓度通常为 5-50  $\mu$ M, 具体需根据实验体系优化。溶液现配现用, 剩余溶液应丢弃不可重复冻存。

### 5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度  $>96\%$ , 批次间质量稳定。MS 和 NMR 谱图验证结构准确

性。Iberin 对眼睛、皮肤和呼吸道有强烈刺激性，接触后应立即用大量清水冲洗。吞食有害，操作时应避免吸入蒸气。废弃物需按危险化学品处理规范处置。实验动物研究表明高剂量可能引起胃肠道刺激，建议研究者根据具体实验设计进行剂量优化。