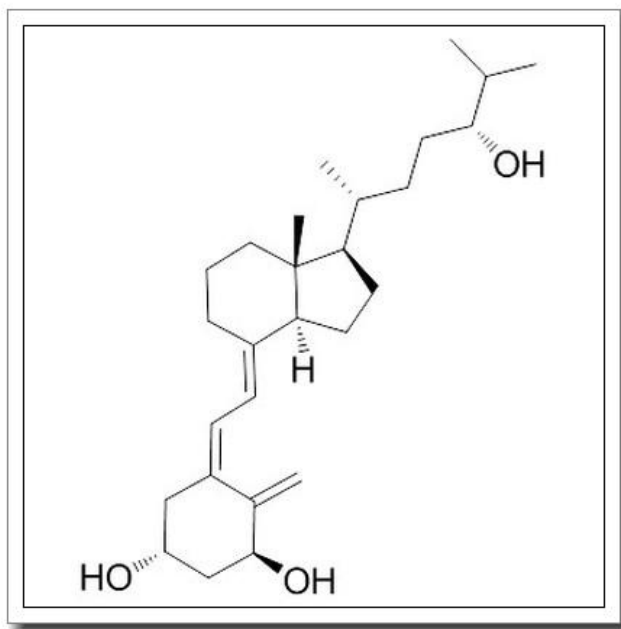


他卡西妥

(1R, 3S, 5Z)-5-[(2E)-2-[(1R, 3aS, 7aR)-1-[(2R, 5R)-5-hydroxy-6-methylheptan-2-yl]-7a-methyl-2, 3, 3a, 5, 6, 7-hexahydro-1H-inden-4-ylidene]ethylidene]-4-methylidenecyclohexane-1, 3-diol



产品基本信息

属性	值
化学名称	(1R, 3S, 5Z)-5-[(2E)-2-[(1R, 3aS, 7aR)-1-[(2R, 5R)-5-hydroxy-6-methylheptan-2-yl]-7a-methyl-2, 3, 3a, 5, 6, 7-hexahydro-1H-inden-4-ylidene]ethylidene]-4-methylidenecyclohexane-1, 3-diol
中文名称	他卡西妥
CAS 号	57333-96-7
分子式	C ₂₇ H ₄₄ O ₃
分子量	416.637
纯度	>96%

产品说明

他卡西妥产品说明书

1. 产品概述与化学特性

他卡西妥（化学名称：(1R, 3S, 5Z)-5-[(2E)-2-[(1R, 3aS, 7aR)-1-[(2R, 5R)-5-hydroxy-6-methylheptan-2-yl]-7a-methyl-2, 3, 3a, 5, 6, 7-hexahydro-1H-inden-4-ylidene]ethylidene]-4-methylidenecyclohexane-1, 3-diol）是一种高纯度生化试剂，CAS 号为 57333-96-7，分子式为 C₂₇H₄₄O₃，分子量为 416.637。本品为白色至类白色结晶性粉末，纯度超过 96%，具有特定的立体构型，属于二萜类化合物衍生物。其化学结构包含多环体系和羟基官能团，赋予其独特的亲脂性和生物活性。

2. 生物化学功能与重要性

他卡西妥作为维生素 D₃ 类似物的中间体或代谢产物，在钙磷代谢调节中发挥潜在作用。其结构中的共轭双键和羟基化侧链可能参与核受体结合，影响细胞分化与增殖相关信号通路。在研究中，该化合物常用于探索类固醇激素受体的配体-受体相互作用机制，或作为合成更复杂活性分子的关键砌块。

3. 主要应用领域与具体用途

他卡西妥主要应用于药物研发领域，尤其在维生素 D 类似物合成中作为重要前体。具体用途包括：作为标准品用于 HPLC 或 LC-MS 方法开发；在代谢研究中作为参照物质；用于骨质疏松或免疫调节相关新药的活性筛选。此外，在生化机理研究中可用于探究脂溶性信号分子的膜穿透性与细胞内转运特性。

4. 储存条件与使用建议

本品需严格避光保存于-20℃以下惰性气体环境中，开封后建议分装使用以避免反复冻融。使用前需平衡至室温并短暂氮气吹扫。溶解时推荐选用无水乙醇或 DMSO 作为溶剂，配制后溶液需现配现用。实验操作应在惰性气氛手套箱或通风橱中进行，避免接触强氧化剂与酸性条件。

5. 质量控制与安全信息

本品通过 HPLC-UV 及质谱联用技术进行纯度验证，残留溶剂符合 ICH 标准。安全数据表明，其急性毒性较低（LD50>2000 mg/kg，大鼠口服），但仍需佩戴防护手套与护目镜操作。废弃物应作为有机卤化物处理，不可直接排放。详细毒理学数据请参阅随附的 MSDS 文件。

注：本产品仅限科研用途，不可用于临床、诊断或食品添加剂领域。使用者应具备专业化学知识并遵守当地实验室安全规范。