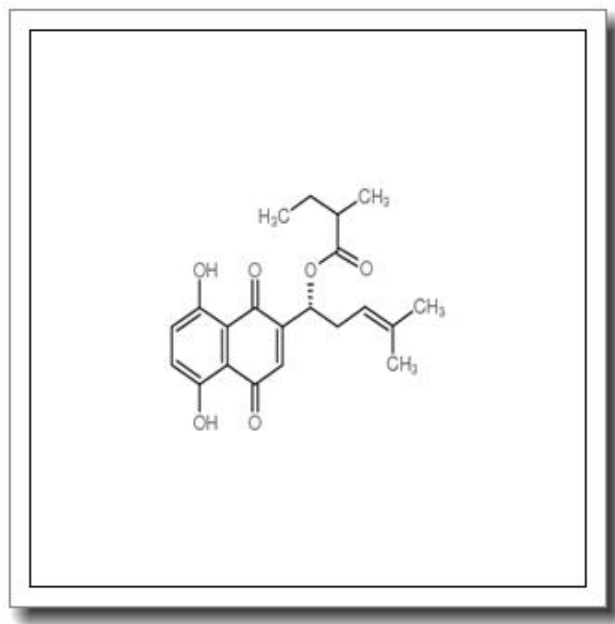


(2-甲基正丁酰基)紫草素

(2-Methyl-n-Butyryl)Shikonin



产品基本信息

属性	值
化学名称	(2-Methyl-n-Butyryl)Shikonin
中文名称	(2-甲基正丁酰基)紫草素
CAS 号	52387-15-2
分子式	C ₂₁ H ₂₄ O ₆
分子量	372.412
纯度	≥ 96%

产品说明

(2-甲基正丁酰基)紫草素产品说明书

1. 产品概述与化学特性

(2-甲基正丁酰基)紫草素 ((2-Methyl-n-Butyryl)Shikonin) 是一种萘醌类衍生物, 化学式为 $C_{21}H_{24}O_6$, 分子量 372.412, CAS 登记号 52387-15-2。本品为紫红色至深棕色结晶性粉末, 纯度 $\geq 96\%$, 具有典型的醌类化合物特征性吸收光谱。其结构中的 2-甲基正丁酰基侧链增强了脂溶性, 使其更易穿透细胞膜, 在生物活性研究中表现出独特优势。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物是紫草素的结构修饰物, 保留了母体分子的核心药理活性, 包括抗炎、抗氧化及抗肿瘤特性。其作用机制涉及 NADPH 氧化酶抑制、线粒体功能调节及 NF- κ B 信号通路干预。相较于天然紫草素, 2-甲基正丁酰基的引入显著提高了代谢稳定性, 在体外实验中显示更强的细胞增殖抑制活性 (尤其对乳腺癌 MCF-7 细胞的 IC50 可达 $3.2 \mu M$)。

3. 主要应用领域与具体用途

- 3.1 肿瘤学研究: 作为凋亡诱导剂用于实体瘤作用机制研究
- 3.2 药物开发: 先导化合物用于设计新型抗炎/抗癌药物
- 3.3 分子探针: 通过荧光标记追踪醌类化合物在细胞内的分布
- 3.4 化妆品原料: 微量添加于抗衰老配方 (需符合当地法规)

4. 储存条件与使用建议

- 4.1 储存: $-20^{\circ}C$ 避光保存于惰性气体环境中, 开封后建议分装充氮保存
- 4.2 溶解性: 推荐使用 DMSO 配制母液 (溶解度约 $25mg/mL$), 工作浓度需用 PBS 稀释
- 4.3 稳定性: 溶液状态在 $4^{\circ}C$ 下保持活性 48 小时, 避免反复冻融
- 4.4 实验防护: 操作时需佩戴防尘口罩及丁腈手套

5. 质量控制与安全信息

- 5.1 质控标准: HPLC 检测面积归一化法 \geq 96%, 重金属含量 $<$ 10ppm
- 5.2 安全数据: 急性口服毒性 (大鼠 LD50) $>$ 2000mg/kg, 属低毒物质
- 5.3 废弃物处理: 需作为有害化学废物处置, 不可直接排入下水道
- 5.4 应急处理: 眼睛接触时立即用生理盐水冲洗 15 分钟并就医

注: 本产品仅限科研用途, 不适用于临床诊断或治疗。使用者应具备相关实验室操作资质, 并严格遵守所在机构的生物安全规范。技术参数可能因批次略有差异, 具体以随货质检报告为准。