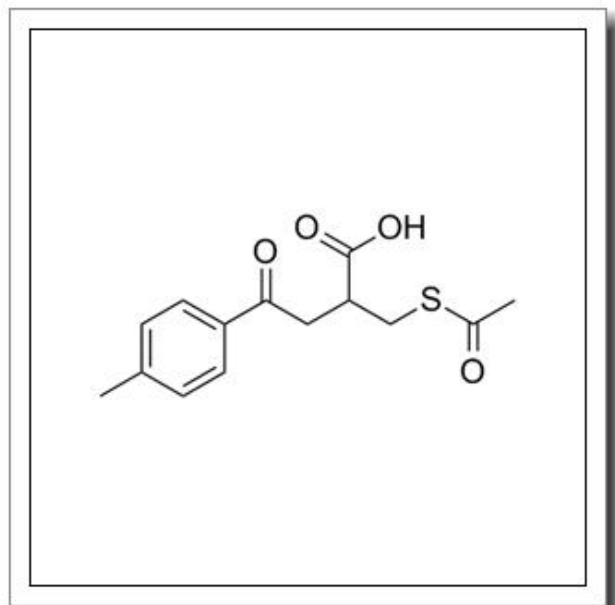


Esonarimod

2-(acetylsulfanylmethyl)-4-(4-methylphenyl)-4-oxobutanoic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-(acetylsulfanylmethyl)-4-(4-methylphenyl)-4-oxobutanoic acid
中文名称	Esonarimod
CAS 号	101973-77-7
分子式	C14H16O4S
分子量	280.339
纯度	≥ 96%

产品说明

2-(乙酰硫基甲基)-4-(4-甲基苯基)-4-氧代丁酸 (Esonarimod) 产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本品化学名称为 2-(acetylsulfanylmethyl)-4-(4-methylphenyl)-4-oxobutanoic acid, CAS 号为 101973-77-7, 分子式 C₁₄H₁₆O₄S, 分子量 280.339。外观为白色至类白色结晶性粉末, 纯度 ≥96%。该化合物属于含硫有机酸衍生物, 结构中包含乙酰硫基甲基和 4-甲基苯甲酰基团, 具有特定的极性和溶解性 (溶于 DMSO、甲醇, 微溶于水)。

2. 生物化学功能与重要性

Esonarimod 是一种具有免疫调节活性的小分子化合物, 通过调控鞘氨醇-1-磷酸受体 (S1PR) 信号通路发挥作用。其乙酰硫基结构在体内代谢后可转化为活性形式, 影响淋巴细胞迁移和炎症反应, 在自身免疫性疾病研究中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于医药研发领域, 包括但不限于:

- 作为 S1PR 调节剂的候选药物分子
- 多发性硬化症和炎症性肠病的临床前研究
- 免疫抑制机制研究的工具化合物

实验室使用时需根据实验设计配制适当浓度的 DMSO 储备液, 推荐工作浓度需通过剂量效应实验确定。

4. 储存条件与使用建议

储存于 -20°C 干燥避光环境, 有效期 24 个月。开封后建议分装保存以避免反复冻融。使用时需在通风橱中操作, 佩戴防护手套和护目镜。溶解性测试表明, 推荐先以 DMSO 配制成母液 (如 10mM), 再用缓冲液稀释至工作浓度。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 ≥96%, 批号相关 COA 可随货提供。安全数据:

- GHS 分类: 皮肤刺激 (Category 2)、眼刺激 (Category 2A)

- 应急处理：接触皮肤时立即用肥皂水冲洗，眼睛接触需用生理盐水冲洗 15 分钟
- 废弃物处置：按危险化学品规范处理

注：本产品仅限科研用途，不适用于诊断或治疗用途。具体实验方案请参考文献或咨询专业技术支持。