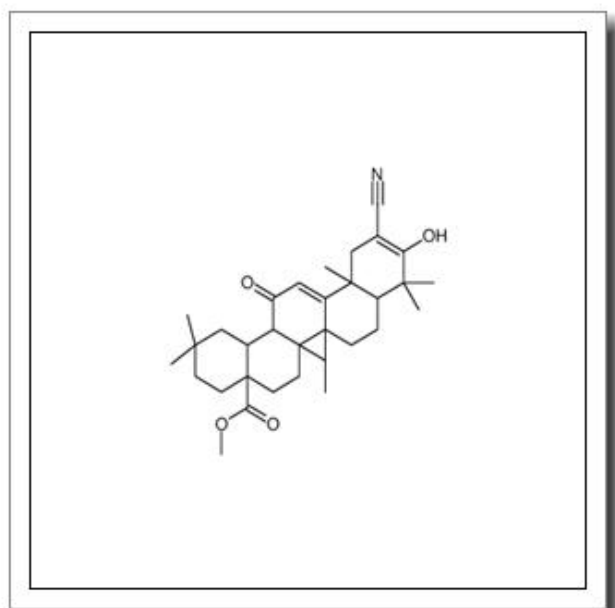


# Methyl (5 $\xi$ ,18 $\alpha$ )-2-cyano-3-hydroxy-12-oxooleana-2,9(11)-dien-28-olate

*Methyl (5 $\xi$ , 18 $\alpha$ )-2-cyano-3-hydroxy-12-oxooleana-2,9(11)-dien-28-olate*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	Methyl (5 $\xi$ , 18 $\alpha$ )-2-cyano-3-hydroxy-12-oxooleana-2,9(11)-dien-28-olate
中文名称	Methyl (5 $\xi$ , 18 $\alpha$ )-2-cyano-3-hydroxy-12-oxooleana-2,9(11)-dien-28-olate
CAS 号	305818-40-0
分子式	C <sub>32</sub> H <sub>45</sub> N <sub>0</sub> O <sub>4</sub>
分子量	507.704
纯度	≥96%

## 产品说明

### 1. 产品概述与化学特性

本品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 Methyl (5 $\xi$ , 18 $\alpha$ )-2-cyano-3-hydroxy-12-oxooleana-2,9(11)-dien-28-oate, CAS 号为 305818-40-0, 分子式为 C<sub>32</sub>H<sub>45</sub>N<sub>04</sub>, 分子量为 507.704。其纯度经高效液相色谱 (HPLC) 测定不低于 96%，结构中含有氰基、羟基和羰基等活性官能团，属于齐墩果烷型三萜衍生物，具有显著的立体选择性和化学稳定性。

### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物通过特异性调控细胞信号通路（如 NF- $\kappa$ B 和 STAT3），表现出抗炎、抗肿瘤及免疫调节活性。其结构中 12 位羰基和 2 位氰基的协同作用可增强与靶蛋白的结合能力，而 28 位甲酯化则改善了脂溶性和生物利用度，在药物先导化合物开发中具有重要价值。

### 3. 主要应用领域与具体用途

作为高活性生化试剂，主要用于以下领域：

- 药物研发：用于筛选抗肿瘤或抗纤维化药物的体外实验
- 机制研究：作为炎症相关信号通路的分子探针
- 结构修饰：作为三萜类化合物结构改造的关键中间体

建议使用浓度为 0.1-10  $\mu$ M，需通过预实验优化具体条件。

### 4. 储存条件与使用建议

长期储存应置于-20 $^{\circ}$ C、避光、干燥环境中，短期使用可存放于 4 $^{\circ}$ C。本品易吸潮，开封后需充氮密封保存。溶解建议使用 DMSO（浓度 $\leq$ 10 mg/mL），避免反复冻融。实验操作需在通风橱中进行，并佩戴防护装备。

### 5. 质量控制与安全信息

批次纯度均经 HPLC（C18 柱，乙腈/水梯度洗脱）和质谱双重验证，水分含量 $\leq$ 0.5%。根据 GHS 分类，本品属于急性毒性类别 4（口服），操作时需避免吸入或

接触皮肤。如意外接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置应符合危险化学品管理规范。

（注：实际应用前请查阅最新版物质安全数据表 MSDS 并开展风险评估）