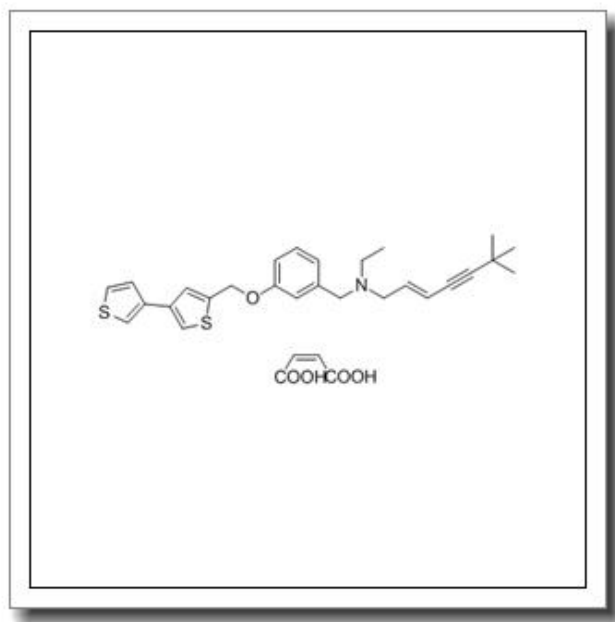


NB-598 马来酸盐

(E)-N-(6,6-dimethyl-2-hepten-4-ynyl)-N-ethyl-3-[4-(thien-3-yl)-thien-2-ylmethoxy]benzylamine maleate



产品基本信息

属性	值
化学名称	(E)-N-(6,6-dimethyl-2-hepten-4-ynyl)-N-ethyl-3-[4-(thien-3-yl)-thien-2-ylmethoxy]benzylamine maleate
中文名称	NB-598 马来酸盐
CAS 号	155294-62-5
分子式	C ₃₁ H ₃₅ N ₀ S ₂
分子量	565.743
纯度	≥ 96%

产品说明

NB-598 马来酸盐产品说明书

产品概述与化学特性

NB-598 马来酸盐是一种高纯度小分子化合物，化学名称为(E)-N-(6,6-二甲基-2-庚烯-4-炔基)-N-乙基-3-[4-(噻吩-3-基)-噻吩-2-基甲氧基]苄胺马来酸盐，CAS 号为 155294-62-5。其分子式为 C₃₁H₃₅N₀₅S₂，分子量为 565.743，纯度标准 ≥96%。该化合物以白色至类白色结晶粉末形式存在，具有特定的立体构型（E 式烯烃结构），结构中包含双噻吩环和苄胺基团，马来酸盐形式提高了其水溶性和稳定性。

生物化学功能与重要性

作为选择性角鲨烯环氧化酶（SE）抑制剂，NB-598 通过特异性抑制胆固醇生物合成途径中的关键酶，阻断 2,3-氧化角鲨烯向羊毛甾醇的转化。这种作用机制使其成为研究胆固醇代谢调控、动脉粥样硬化发病机理的重要工具化合物。其抑制活性在纳摩尔级别（IC₅₀ 约 20nM），对肝 X 受体（LXR）等其他脂代谢相关靶点无明显交叉活性。

主要应用领域与具体用途

1. 基础研究：用于探索胆固醇生物合成途径的分子机制，特别是 SE 酶的功能研究
2. 药物开发：作为先导化合物用于抗高胆固醇血症药物的筛选与优化
3. 细胞模型构建：建立胆固醇代谢异常的体外研究模型
4. 协同效应研究：与其他降脂药物联用时的药效学评价

建议工作浓度为 10-100nM（需根据实验体系优化），适用于细胞培养和体外酶学实验。

储存条件与使用建议

长期储存应置于-20℃干燥避光环境，开封后建议分装保存以避免反复冻融。溶解时可用少量 DMSO 助溶（推荐储存浓度为 10mM），再用缓冲液稀释至工作浓度。

溶液形式在 4℃ 下可稳定保存 72 小时，-80℃ 可保存 6 个月。实验操作建议在惰性气体保护下进行，特别是长期储存的溶液。

质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 验证纯度 $\geq 96\%$ ，批号相关 COA 可应要求提供。MS 和 NMR 数据符合结构标准。作为生物活性物质，操作时需佩戴防护装备，避免直接接触。急性毒性数据显示其 LD₅₀（小鼠口服）为 320mg/kg，属于第 3 类危险物质。废弃物处理应遵守有机化合物处置规范，不可直接排入下水系统。