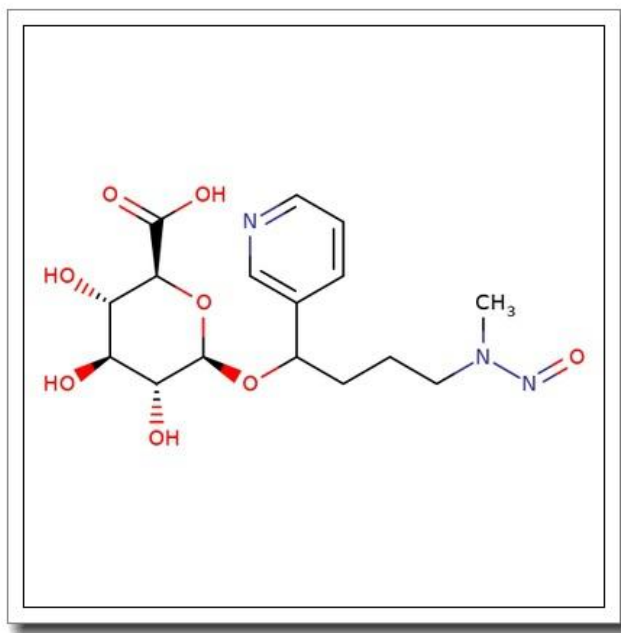


4-(Methyl-D3-nitrosamino)-1-(3-pyridyl)-1-butanol-N-b-D-glucuronide



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-(Methyl-D3-nitrosamino)-1-(3-pyridyl)-1-butanol-N-b-D-glucuronide
产品目录号	BGGCB-1243
CAS 号	131119-04-5
分子式	C ₁₆ H ₂₁ D ₃ N ₃ O ₈
分子量	389.39 g/mol
纯度	>96%

产品说明

4-(甲基-D3-亚硝基氨基)-1-(3-吡啶基)-1-丁醇-N-b-D-葡萄糖醛酸苷产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为氘代标记的亚硝胺代谢物衍生物，化学名称为 4-(Methyl-D3-nitrosamino)-1-(3-pyridyl)-1-butanol-N-b-D-glucuronide, CAS 号 131119-04-5。分子式为 C₁₆H₂₁D₃N₃O₈，分子量 389.39 g/mol，纯度经 HPLC 验证大于 96%。该化合物是烟草特有亚硝胺 NNK（4-(甲基亚硝胺基)-1-(3-吡啶基)-1-丁酮）在人体内的主要葡萄糖醛酸结合代谢产物，其氘代结构（D3 标记）显著提升了质谱检测灵敏度，适用于同位素稀释定量分析。

2. 生物化学功能与重要性

作为 NNK 的终端代谢标志物，本产品在毒理学研究中具有关键价值。其葡萄糖醛酸化结构反映了肝脏 Phase II 代谢酶的活性，而 D3 标记避免了内源性代谢物的干扰，可精准追踪 NNK 暴露水平。该特性使其成为评估烟草致癌风险、研究代谢通路及酶动力学的重要工具。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于以下领域：

- 烟草致癌机制研究：作为 NNK 生物标志物，定量分析吸烟者或被动吸烟者的亚硝胺负荷。
- 代谢组学：用于 LC-MS/MS 方法开发，建立高灵敏度检测标准。
- 毒理学评估：通过同位素标记技术研究 NNK 的代谢速率和组织分布。
- 临床前研究：验证抗癌药物对亚硝胺代谢途径的干预效果。

4. 储存条件与使用建议

储存于-20℃避光干燥环境，开封后需充氮密封保存。建议溶解于甲醇或乙腈-水（1:1）混合溶剂，浓度配置为 1-10 mM 储备液，避免反复冻融（≤3 次）。实验操作需在通风橱中进行，穿戴防护手套及护目镜。

5. 质量控制与安全信息

批次产品均通过 NMR、HPLC-MS 双重验证，确保同位素丰度 $\geq 98\%$ (D3)、化学纯度 $> 96\%$ 。本品属潜在致癌物，CAS 风险代码 T (有毒)，UN 编号 2811。运输需符合危险化学品条例，废弃物处置应参照当地有机有害物处理标准。

(注：本说明基于当前科学认知，具体应用需结合实验方案调整。安全数据表 (SDS) 可随货提供或联系技术支持获取。)