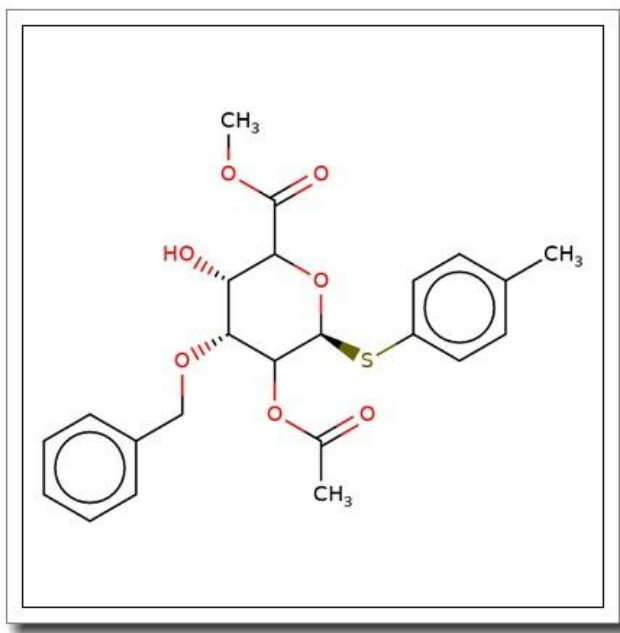


4-Methylphenyl 2-O-acetyl-3-O-benzyl- b-D-thioglucuronide methyl ester



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-Methylphenyl 2-O-acetyl-3-O-benzyl-b-D-thioglucuronide methyl ester
产品目录号	BGGCB-1471
CAS 号	866347-91-3
分子式	C ₂₃ H ₂₆ O ₇ S
分子量	446.51 g/mol
纯度	>96%

产品说明

4-Methylphenyl 2-O-acetyl-3-O-benzyl- β -D-thioglucuronide methyl ester 产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为高纯度有机硫化合物，化学名称 4-Methylphenyl 2-O-acetyl-3-O-benzyl- β -D-thioglucuronide methyl ester，CAS 号 866347-91-3，分子式 C₂₃H₂₆O₇S，分子量 446.51 g/mol。其结构包含硫代葡萄糖醛酸甲酯骨架，经 2 位乙酰化和 3 位苄基化修饰，4 位连接对甲苯基，具有明确的立体构型（ β -D 构型）。产品为白色至类白色结晶性粉末，纯度经 HPLC 验证 $\geq 96\%$ ，适用于高精度生化研究。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物是糖苷酶及糖基转移酶研究的关键底物类似物，其硫代糖苷键可抵抗水解酶裂解，常用于酶促反应机理研究。苄基与乙酰基的引入增强了疏水性，使其在膜穿透性和细胞实验中有独特优势。作为葡萄糖醛酸衍生物，在药物代谢（如 II 相代谢酶 UGT 研究）和糖生物学领域具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于三大领域：一是作为糖基化抑制剂，用于肿瘤细胞表面糖链修饰研究；二是作为荧光标记前体，经去保护后可偶联报告基因；三是用于构建药物递送系统，其硫酯键可实现 pH 响应性释放。典型实验包括：UGT 酶活性测定、糖蛋白工程改造、抗炎药物靶点筛选等。

4. 储存条件与使用建议

建议长期储存于 -20℃ 惰性气体（如氩气）保护下，短期使用可存放于 2-8℃ 干燥器。开封前需平衡至室温以避免吸湿。溶解时优先选用无水 DMSO 或乙腈，工作浓度建议通过预实验确定（常用范围 0.1-10 mM）。因对光敏感，实验操作需避光。

5. 质量控制与安全信息

批次质检报告包含 HPLC 纯度（ $\geq 96\%$ ）、NMR 结构验证及水分含量（ $\leq 0.5\%$ ）数

据。本品属于刺激性化学品，操作时需佩戴护目镜及丁腈手套，避免吸入粉尘。如接触皮肤，立即用大量清水冲洗 15 分钟。废弃物处置应遵守有机硫化合物专业处理规范，不可直接排入下水系统。

（注：本说明基于现有研究数据编制，具体应用需结合实验体系优化条件。）