

Atorvastatin acyl-b-D-glucuronide

产品图片未找到

产品基本信息

属性	值
化学名称	Atorvastatin acyl-b-D-glucuronide
产品目录号	BGGCB-6200
CAS 号	463962-58-5
分子式	C ₃₉ H ₄₅ FN ₂ O ₁₁
分子量	736.8 g/mol
纯度	>96%

产品说明

以下是根据您的要求撰写的专业产品说明:

产品名称: Atorvastatin acyl- β -D-glucuronide

产品目录号: BGGCB-6200

CAS 号: 463962-58-5

1. 产品概述与化学特性

Atorvastatin acyl- β -D-glucuronide 是阿托伐他汀的主要代谢产物之一, 属于他汀类药物的葡萄糖醛酸结合物。其化学式为 $C_{39}H_{45}FN_{2}O_{11}$, 分子量为 736.8 g/mol。本品为白色至类白色粉末, 纯度经 HPLC 测定大于 96%。该化合物在生理条件下呈现弱酸性, 易溶于甲醇、DMSO 等有机溶剂, 微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为阿托伐他汀的 II 相代谢产物, 本品通过 UGT1A1 和 UGT1A3 介导的葡萄糖醛酸化反应生成。在药物代谢研究中具有重要价值, 可用于评估肝脏代谢酶活性及药物相互作用潜力。其形成过程反映了机体对他汀类药物的解毒机制, 是研究药物代谢动力学和个体化用药的重要生物标志物。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要应用于以下领域: 药物代谢研究, 作为阿托伐他汀代谢研究的参考标准品; 临床药理学研究, 用于建立 LC-MS/MS 分析方法; 毒理学研究, 评估药物代谢产物的潜在毒性; 制药工业质量控制, 作为工艺开发和产品放行的对照品。在体外实验中, 可用于培养肝细胞代谢模型和重组酶活性测定。

4. 储存条件与使用建议

建议储存于 -20°C 干燥避光环境中, 长期保存应置于惰性气体保护下。开封后建议分装使用, 避免反复冻融。使用时需在干燥氮气环境下操作, 溶解建议采用预冷的甲醇或特定缓冲体系。工作溶液应当日配制, 不建议长期保存。实验操作应在符合 GLP 要求的实验室中进行。

5. 质量控制与安全信息

本品经严格的质量控制流程，包括 NMR、HPLC 和质谱验证。MSDS 数据显示该化合物属于刺激性物质，操作时应佩戴防护手套和护目镜，避免吸入粉尘或接触皮肤。如意外接触，应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理应符合当地危险化学品处置规范。运输分类为非危险品，但建议使用专业冷链运输。