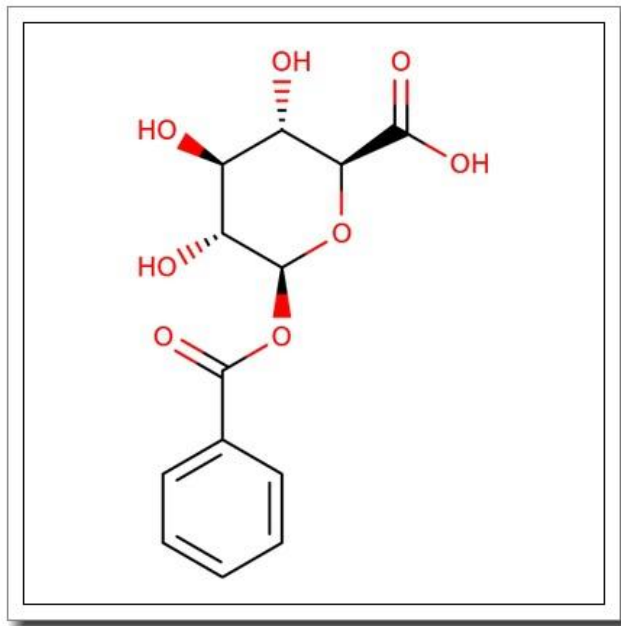


Benzoic acid-acyl-b-D-glucuronide



产品基本信息

属性	值
化学名称	Benzoic acid-acyl-b-D-glucuronide
产品目录号	BGGCB-3480
CAS 号	19237-53-7
分子式	C ₁₃ H ₁₄ O ₈
分子量	298.25 g/mol
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为苯甲酸酰基-β-D-葡萄糖醛酸苷 (Benzoic acid-acyl-β-D-glucuronide)，化学式为 C₁₃H₁₄O₈，分子量 298.25 g/mol，CAS 登记号 19237-53-7。产品以白色至类白色结晶粉末形式提供，纯度经 HPLC 验证大于 96%。该化合物属于葡萄糖醛酸苷衍生物，其结构中的 β-糖苷键赋予其特定的生物代谢稳定性，同时酰基化修饰增强了脂溶性。在紫外光谱中呈现特征性吸收峰 (λ_{max} ≈ 254 nm)，适用于光谱分析法检测。

2. 生物化学功能与重要性

作为 II 相代谢产物的典型代表，本产品是苯甲酸在肝脏中经 UDP-葡萄糖醛酸转移酶 (UGT) 催化生成的关键结合物。其形成是生物体内解毒通路的重要环节，通过增加水溶性促进外源物质排泄。在药物代谢研究中，该化合物可作为探针分子用于评估 UGT 酶活性，亦可用于研究肠道菌群 β-葡萄糖醛酸苷酶介导的肠肝循环机制。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于以下领域：

- 药物代谢研究：作为 UGT 酶底物用于体外代谢稳定性实验
- 毒理学分析：作为苯甲酸暴露的生物标志物
- 分子探针开发：用于设计荧光标记的葡萄糖醛酸苷类检测试剂
- 标准品制备：用于 HPLC 或 LC-MS 法建立药物代谢产物定量方法

4. 储存条件与使用建议

产品应严格避光保存于 -20℃ 干燥环境中，开封后需充氮密封。溶解建议使用 pH7.4 磷酸缓冲液或甲醇/水 (1:1) 混合溶剂，避免强酸强碱条件以防止糖苷键水解。工作液需现配现用，长期保存建议分装冻存于 -80℃。

5. 质量控制与安全信息

本品经三重质控 (HPLC 纯度检测、质谱结构验证、水分含量测定)，批间差异小

于 2%。根据 GHS 分类，属于刺激性化学品（皮肤刺激类别 2），操作时需佩戴防护手套及护目镜。如接触皮肤，立即用大量清水冲洗至少 15 分钟。废弃物处置应遵守当地危险化学品管理法规。

注：具体实验方案需结合目标体系优化，建议参考文献
DOI:10.1016/j.jchromb.2018.03.043 获取最新应用数据。