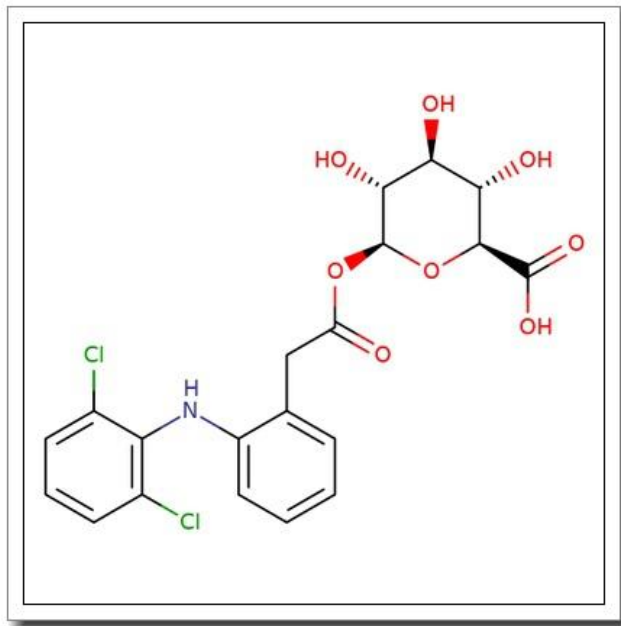


Diclofenac acyl-D-glucuronide



产品基本信息

属性	值
化学名称	Diclofenac acyl-D-glucuronide
产品目录号	BGGCB-4300
CAS 号	64118-81-6
分子式	C ₂₀ H ₁₉ C ₁₂ N ₀₈
分子量	472.27 g/mol
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

双氯芬酸酰基-D-葡萄糖醛酸苷 (Diclofenac acyl-D-glucuronide, 目录号 BGGCB-4300, CAS 号 64118-81-6) 是一种重要的药物代谢产物, 由非甾体抗炎药双氯芬酸在体内经葡萄糖醛酸转移酶催化生成。其分子式为 $C_{20}H_{19}Cl_2N_2O_8$, 分子量为 472.27 g/mol, 纯度高于 96%。该化合物为白色至类白色粉末, 可溶于甲醇、二甲基亚砜等有机溶剂, 在水中的溶解度较低。其结构包含双氯芬酸母核与葡萄糖醛酸通过酰基键结合, 具有典型的 β -葡萄糖醛酸苷特性。

2. 生物化学功能与重要性

双氯芬酸酰基-D-葡萄糖醛酸苷是双氯芬酸在肝脏代谢的主要产物之一, 属于 II 相代谢物。其形成过程是药物解毒和排泄的关键步骤, 但该代谢物也可能参与药物毒性反应, 如与蛋白质共价结合导致肝损伤。因此, 该化合物在药物代谢研究、毒性机制分析及药代动力学模型中具有重要价值, 常作为标准品用于体外和体内代谢实验。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于以下领域: 药物代谢研究——作为双氯芬酸代谢的标记物, 用于液相色谱-质谱 (LC-MS) 分析; 毒理学研究——评估代谢产物的潜在毒性; 制药质量控制——作为标准品用于原料药和制剂中代谢杂质的定量分析。此外, 还可用于酶动力学研究, 探究葡萄糖醛酸转移酶的活性与特异性。

4. 储存条件与使用建议

建议将产品密封保存于 $-20^{\circ}C$ 干燥避光环境中, 长期储存需置于惰性气体保护下。使用时恢复至室温并避免反复冻融。溶解时推荐使用甲醇或乙腈-水混合溶剂, 配制溶液需现配现用。实验操作需在通风橱中进行, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和质谱分析验证纯度, 批号相关检测报告可随货提供。其 CAS 号

与分子结构经核磁共振（NMR）确认。安全信息显示，该化合物可能对眼睛、皮肤和呼吸系统有刺激性，操作时应佩戴防护手套、护目镜及口罩。若发生接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物需按危险化学品规范处置。

（注：以上信息基于现有研究数据，具体应用需结合实验条件进一步优化。）