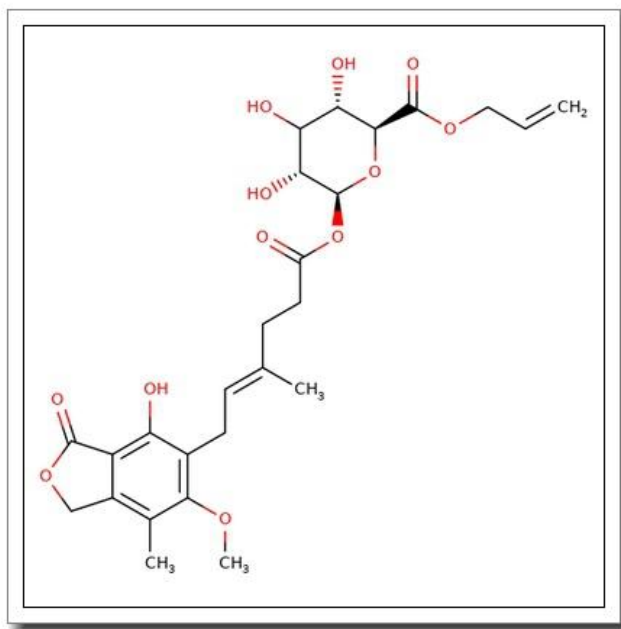


Mycophenolic acid acyl-b-D-glucuronide allyl ester



产品基本信息

属性	值
化学名称	Mycophenolic acid acyl-b-D-glucuronide allyl ester
产品目录号	BGGCB-1886
CAS 号	860615-39-0
分子式	C ₂₆ H ₃₂ O ₁₂
分子量	536.53 g/mol
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为霉酚酸酰基-β-D-葡萄糖醛酸苄丙酯 (Mycophenolic acid acyl-β-D-glucuronide allyl ester)，化学式 C₂₆H₃₂O₁₂，分子量 536.53 g/mol，CAS 登记号 860615-39-0。该化合物是霉酚酸 (MPA) 的葡萄糖醛酸化衍生物，通过烯丙酯化修饰增强其脂溶性。产品为白色至类白色结晶性粉末，纯度经 HPLC 验证 ≥96%，易溶于有机溶剂如 DMSO 和甲醇，在水溶液中溶解性较低。其结构中的葡萄糖醛酸基团和烯丙酯键赋予其独特的代谢稳定性和反应活性。

2. 生物化学功能与重要性

作为免疫抑制剂霉酚酸的活性代谢产物前体，本品在体内可通过酯酶水解释放霉酚酸酰基-β-D-葡萄糖醛酸苄 (AcMPAG)，进而参与抑制次黄嘌呤单核苷酸脱氢酶 (IMPDH)，阻断淋巴细胞 DNA 合成。其葡萄糖醛酸化结构显著影响药物代谢动力学特性，是研究霉酚酸肝肠循环和药物相互作用的关键分子工具。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于免疫抑制药物的代谢机制研究，包括：

- 1) 作为标准品用于 LC-MS/MS 法检测生物样本中 AcMPAG 及其衍生物
- 2) 体外代谢模型 (如肝微粒体实验) 中评估葡萄糖醛酸转移酶活性
- 3) 开发新型前药制剂，优化霉酚酸类药物的生物利用度
- 4) 药物-药物相互作用研究，特别是 UGT 酶介导的代谢竞争实验

4. 储存条件与使用建议

长期储存需置于-20℃干燥避光环境，短期使用可保存于 2-8℃。开封后建议分装保存，避免反复冻融。工作溶液建议现配现用，溶剂优先选择无水 DMSO (浓度 ≤10 mM)。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

批次质量控制包括：

- 1) HPLC 检测纯度 ≥96%

2) 质谱 (MS) 验证分子量

3) 核磁共振 (^1H NMR) 确认结构

安全数据: 本品属于刺激性化学品, 接触皮肤可能引起红肿, 操作时应佩戴防护手套和护目镜。如意外接触, 立即用大量清水冲洗 15 分钟并就医。废弃物处置需符合当地危险化学品管理规定。

(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。)