

N'-Nitrosonornicotine N-β-D-glucuronide (mixture of diastereomers) hydrate

产品图片未找到

产品基本信息

| 属性 | 值 |
|-------|--|
| 化学名称 | N' -Nitrosonornicotine N-β -D-glucuronide (mixture of diastereomers) hydrate |
| 产品目录号 | BGGCB-1936 |
| CAS 号 | 350508-25-7 |
| 分子式 | C ₁₅ H ₁₉ N ₃ O ₇ ·(H ₂ O) _x |
| 分子量 | |
| 纯度 | >96% |

产品说明

N'-亚硝基去甲烟碱-N-β-D-葡萄糖醛酸苷（非对映异构体混合物）水合物产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本品为 N'-亚硝基去甲烟碱（NNN）的葡萄糖醛酸结合物，化学名称 N'-Nitrosonornicotine N-β-D-glucuronide，是烟草特有亚硝胺（TSNA）代谢研究的关键标准品。CAS 号 350508-25-7，分子式 C₁₅H₁₉N₃O₇•(H₂O)_x，分子量因水合物含量差异可能存在浮动。产品为白色至类白色固体，纯度>96%（HPLC 验证），包含非对映异构体混合物，适用于精准代谢物定量分析。

2. 生物化学功能与重要性

作为 NNN 的主要 II 相代谢产物，本品通过葡萄糖醛酸转移酶（UGT）催化形成，在生物体内参与解毒与排泄过程。其存在直接反映 NNN 的代谢激活水平，对研究烟草致癌机制、评估个体代谢差异及毒性风险具有标志性意义。异构体混合物的特性可全面覆盖实际生物样本中的代谢谱。

3. 主要应用领域与具体用途

本品专用于毒理学与药代动力学研究领域：

- 作为内标或校准品，用于 LC-MS/MS 法检测生物样本（尿液、血清）中的 NNN 代谢物
- 烟草制品风险评估中代谢通量研究的参照物质
- 构建体外代谢模型（如肝微粒体实验）的底物或产物标准
- 致癌机理研究中 DNA 加合物形成的关联分析

4. 储存条件与使用建议

储存于-20℃避光干燥环境，开封后建议分装保存以避免反复冻融。使用时以甲醇或水溶解（溶解度>5 mg/mL），现配现用。需注意：

- 水合物形式可能导致实际称量浓度偏差，建议通过水分滴定校正
- 异构体比例可能因批次略有差异，定量分析时建议配套使用同批次标准曲线

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC-UV/ELSD 双系统验证纯度，批号相关 COA 可随货提供。本品属潜在致癌物，操作需在通风橱中进行，佩戴防渗透手套及护目镜。废弃物应按危险化学品处理，避免接触强氧化剂。急性毒性数据参考 NNN (LD50 大鼠口服>500 mg/kg)，具体毒理学参数建议查阅最新文献。

(注：实际分子量需根据水含量计算，x 值参见批次分析证书)