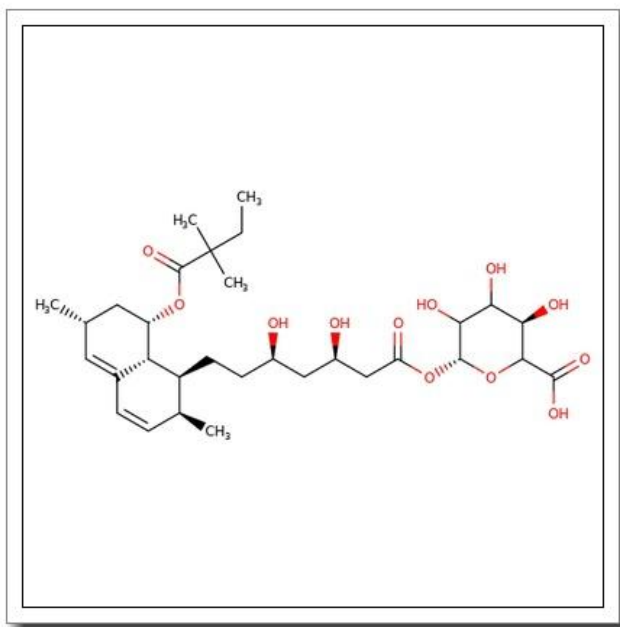


# Simvastatin acyl-b-D-glucuronide



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	Simvastatin acyl-b-D-glucuronide
产品目录号	BGGCB-2228
CAS 号	463962-56-3
分子式	C <sub>31</sub> H <sub>48</sub> O <sub>12</sub>
分子量	612.71 g/mol
纯度	>96%

## 产品说明

### 1. 产品概述与化学特性

Simvastatin acyl- $\beta$ -D-glucuronide (辛伐他汀酰基- $\beta$ -D-葡萄糖醛酸苷) 是一种重要的辛伐他汀代谢产物, 化学式为 C<sub>31</sub>H<sub>48</sub>O<sub>12</sub>, 分子量为 612.71 g/mol, CAS 号为 463962-56-3。本品为白色至类白色粉末, 纯度超过 96%, 具有高度的化学稳定性和生物活性。其结构由辛伐他汀与葡萄糖醛酸通过酰基键结合而成, 是研究药物代谢和转运机制的关键化合物。

### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物在体内通过 UGT (尿苷二磷酸葡萄糖醛酸转移酶) 介导的葡萄糖醛酸化反应生成, 是辛伐他汀的主要代谢途径之一。其形成与消除直接影响辛伐他汀的药效学和药代动力学特性。作为代谢标志物, Simvastatin acyl- $\beta$ -D-glucuronide 可用于评估肝脏代谢活性、药物相互作用以及个体化用药研究。

### 3. 主要应用领域与具体用途

本产品广泛应用于药物研发、临床研究和毒理学评估领域。具体用途包括: 作为高效液相色谱 (HPLC) 或液相色谱-质谱联用 (LC-MS) 分析的标准品, 用于定量检测生物样本中的辛伐他汀及其代谢物; 作为体外代谢研究的底物或产物, 探索 UGT 酶的特异性与活性; 此外, 还可用于药物-药物相互作用研究和代谢通路验证。

### 4. 储存条件与使用建议

产品应密封保存于 -20° C 干燥环境中, 避免反复冻融和光照。使用时需平衡至室温后称取, 推荐以二甲基亚砜 (DMSO) 或甲醇为溶剂配制母液。工作液需现配现用, 剩余溶液建议分装保存并于 24 小时内使用。操作时需佩戴防护手套和护目镜, 确保通风良好。

### 5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC 和质谱双重验证, 确保纯度 >96%, 水分含量 <1%, 重金属残留符合 USP 标准。安全数据表明, 该化合物可能存在轻微刺激性, 避免直接接触皮肤或吸

入粉尘。如意外接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需遵循当地化学品管理法规。

本产品仅供科研用途，不适用于诊断或治疗。使用者应具备相关专业知识，并严格遵守实验室安全规范。