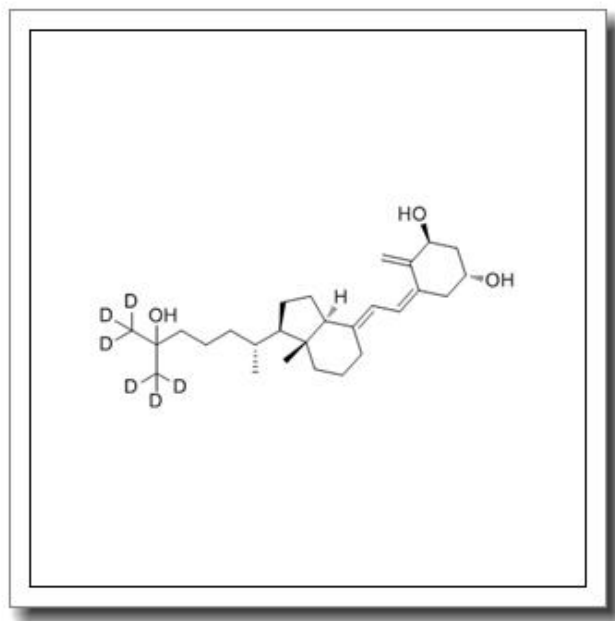


# 骨化三醇 D6

(1R, 3S, 5Z)-5-[(2E)-2-[(1R, 3aS, 7aR)-7a-methyl-1-[(2R)-7, 7, 7-trideuterio-6-hydroxy-6-(trideuteriomethyl)heptan-2-yl]-2, 3, 3a, 5, 6, 7-hexahydro-1H-inden-4-ylidene]ethylidene]-4-methylidenecyclohexane-1, 3-diol



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	(1R, 3S, 5Z)-5-[(2E)-2-[(1R, 3aS, 7aR)-7a-methyl-1-[(2R)-7, 7, 7-trideuterio-6-hydroxy-6-(trideuteriomethyl)heptan-2-yl]-2, 3, 3a, 5, 6, 7-hexahydro-1H-inden-4-ylidene]ethylidene]-4-methylidenecyclohexane-1, 3-diol
中文名称	骨化三醇 D6
CAS 号	78782-99-7
分子式	C <sub>27</sub> H <sub>38</sub> D <sub>6</sub> O <sub>3</sub>
分子量	422. 673
纯度	≥96%



## 产品说明

### 1. 产品概述与化学特性

骨化三醇 D6 ((1R, 3S, 5Z)-5-[(2E)-2-[(1R, 3aS, 7aR)-7a-methyl-1-[(2R)-7, 7, 7-trideuterio-6-hydroxy-6-(trideuteriomethyl)heptan-2-yl]-2, 3, 3a, 5, 6, 7-hexahydro-1H-inden-4-ylidene]ethylidene]-4-methylidenecyclohexane-1, 3-diol) 是一种氘代维生素 D3 活性代谢物, CAS 号为 78782-99-7, 分子式为 C<sub>27</sub>H<sub>38</sub>D<sub>6</sub>O<sub>3</sub>, 分子量为 422.673。其纯度 ≥96%, 具有明确的立体构型, 化学结构中包含 6 个氘原子标记, 显著提高了其在质谱分析中的检测灵敏度与特异性。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 易溶于有机溶剂 (如乙醇、DMSO), 对光、热敏感, 需避光保存。

### 2. 生物化学功能与重要性

骨化三醇 D6 是骨化三醇 (1, 25-二羟基维生素 D<sub>3</sub>) 的稳定同位素标记形式, 作为维生素 D 受体 (VDR) 的高亲和力配体, 参与调节钙磷代谢、细胞分化及免疫调控等生理过程。氘代标记使其成为内源性骨化三醇的理想内标, 广泛应用于药代动力学研究, 可精准量化生物样本中原型药物的浓度, 避免同位素效应干扰。

### 3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于以下领域:

- 药物研发: 作为同位素内标, 用于 LC-MS/MS 法测定骨化三醇的血药浓度, 支持生物等效性评价及代谢研究。
- 临床诊断: 辅助开发维生素 D 缺乏相关疾病 (如佝偻病、骨质疏松) 的检测方法。
- 基础研究: 探究维生素 D 信号通路在癌症、自身免疫疾病中的作用机制。

### 4. 储存条件与使用建议

储存于 -20℃ 以下避光环境, 充惰性气体密封保存。开封后建议分装使用, 避免反复冻融。溶解时选用无水乙醇或 DMSO, 配制工作液需现用现配。实验操作需在黄光或红光条件下进行, 以降低光降解风险。

## 5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC、NMR 及质谱严格验证，确保化学纯度 $\geq 96\%$ 且同位素丰度 $> 99\%$ 。使用时需穿戴防护装备（手套、护目镜），避免吸入或皮肤接触。MSDS 显示其具潜在刺激性，若接触眼睛应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物按危险化学品规范处置。