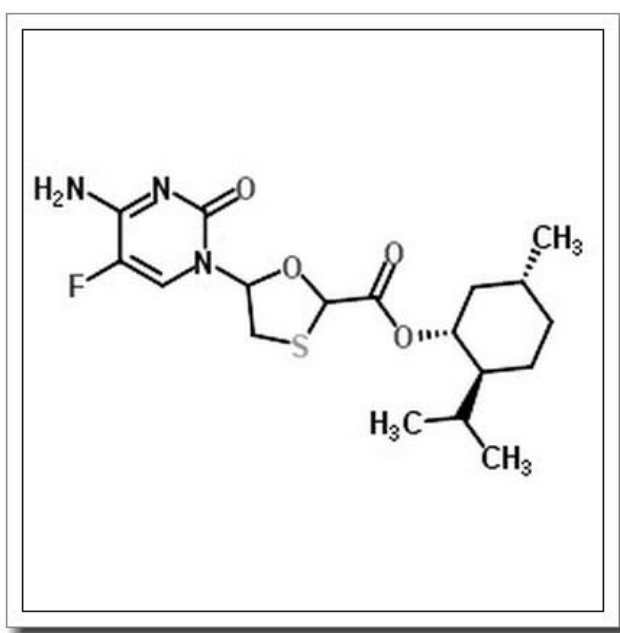


# (2R,5S)-5-(4-氨基-5-氟-2-氧代-1(2H)-嘧啶基)-1,3-噁噻烷-2-羧酸 (1R,2S,5R)-5-甲基-2-(1-甲基乙基)环己酯

*[(1R, 2S, 5R)-5-methyl-2-propan-2-ylcyclohexyl] 5-(4-amino-5-fluoro-2-oxopyrimidin-1-yl)-1,3-oxathiolane-2-carboxylate*



## 产品基本信息

| 属性    | 值  |
|-------|--|
| 化学名称  | [(1R, 2S, 5R)-5-methyl-2-propan-2-ylcyclohexyl] 5-(4-amino-5-fluoro-2-oxopyrimidin-1-yl)-1,3-oxathiolane-2-carboxylate |
| 中文名称  | (2R, 5S)-5-(4-氨基-5-氟-2-氧代-1(2H)-嘧啶基)-1,3-噁噻烷-2-羧酸 (1R, 2S, 5R)-5-甲基-2-(1-甲基乙基)环己酯                                      |
| CAS 号 | 764659-72-5  |
| 分子式   | C18H26FN3O4S   |

|     |        |
|-----|--------|
| 分子量 | 399.48 |
| 纯度  | >96%   |

## 产品说明

### 1. 产品概述与化学特性

本品化学名称为[(1R, 2S, 5R)-5-methyl-2-propan-2-ylcyclohexyl] 5-(4-amino-5-fluoro-2-oxopyrimidin-1-yl)-1,3-oxathiolane-2-carboxylate, 中文名称为(2R, 5S)-5-(4-氨基-5-氟-2-氧代-1(2H)-嘧啶基)-1,3-噁噻烷-2-羧酸(1R, 2S, 5R)-5-甲基-2-(1-甲基乙基)环己酯, CAS 号为 764659-72-5。其分子式为 C<sub>18</sub>H<sub>26</sub>FN<sub>3</sub>O<sub>4</sub>S, 分子量为 399.48, 纯度高于 96%。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 具有特定的立体构型, 属于核苷类似物衍生物, 结构中含有嘧啶环和噁噻烷环, 具有显著的生物活性。

### 2. 生物化学功能与重要性

本品是一种核苷类前药, 其活性代谢物可通过抑制病毒逆转录酶或 DNA 聚合酶, 干扰病毒核酸合成。5-氟修饰的嘧啶结构增强了其抗病毒活性, 尤其对某些 RNA 病毒(如 HIV)和 DNA 病毒(如 HBV)具有潜在抑制作用。其独特的立体构型进一步提高了靶标选择性和代谢稳定性, 在抗病毒药物研发中具有重要价值。

### 3. 主要应用领域与具体用途

该化合物主要用于抗病毒药物的研究与开发, 可作为先导化合物用于优化抗 HIV 或 HBV 药物的活性与药代动力学特性。在医药领域, 它常用于体外酶学实验、细胞模型研究以及药物作用机制探索。此外, 也可作为合成中间体用于制备更复杂的核苷类似物。

### 4. 储存条件与使用建议

建议在-20°C 下避光干燥保存, 长期储存需充入惰性气体保护。使用时需平衡至室温并避免反复冻融。溶解性测试表明, 本品易溶于 DMSO、甲醇等有机溶剂, 水溶性较低, 配制溶液时需根据实验需求选择合适的溶剂。操作时应穿戴防护装备, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。

### 5. 质量控制与安全信息

本品通过 HPLC 检测纯度 ≥96%, 并提供完整的质谱与核磁共振分析数据 (COA 随货

提供)。安全信息显示,该化合物可能对眼睛、皮肤和呼吸道有刺激性,操作应在通风橱中进行。若不慎接触,需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应按照危险化学品规范处置。

以上信息仅供参考,具体实验设计需结合文献与实际需求。