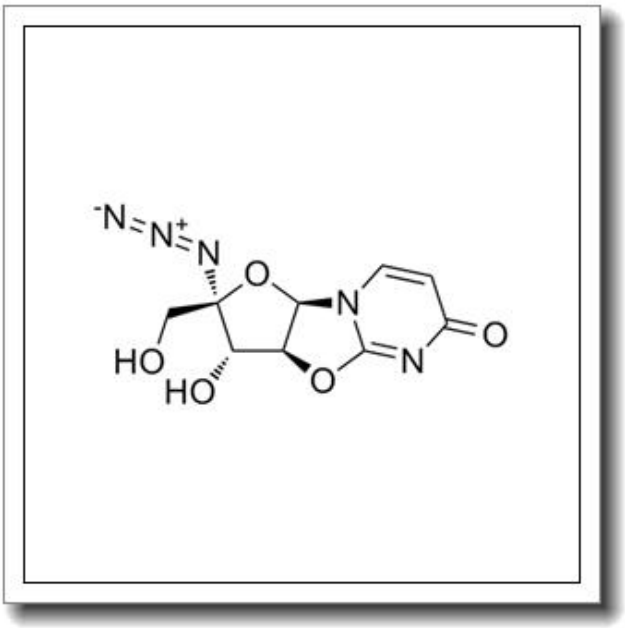
核苷模拟-1

2,2'-anhydro-1-(4'-azido-β-D-arabinofuranosyl)uracil



产品基本信息

属性	值
化学名称	2,2'-anhydro-1-(4'-azido-β-D-arabinofuranosyl)uracil
中文名称	核苷模拟-1
CAS 号	876707-99-2
分子式	C9H9N5O5
分子量	267.198
纯度	≧96%

产品说明

2,2'-脱水-1-(4'-叠氮-β-D-阿拉伯呋喃糖基)尿嘧啶（核苷模拟-1）产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称 2,2'-anhydro-1-(4'-azido-β-D-arabinofuranosyl)uracil，CAS 号 876707-99-2，分子式 C9H9N5O5，分子量 267.198。其结构为修饰核苷类似物，通过 2,2'-脱水键与叠氮基团对阿拉伯糖环进行特异性改造，具有独特的空间构象和电子分布特性。纯度≥96%（HPLC 检测），易溶于 DMSO、DMF 等极性有机溶剂，微溶于水（需超声辅助溶解）。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物通过模拟天然核苷酸结构，可竞争性抑制病毒 RNA 聚合酶或逆转录酶活性。叠氮基团赋予其光交联能力，适用于探针标记与靶点捕获研究。其 2,2'-脱水键增强代谢稳定性，在抗病毒药物研发（尤其针对 RNA 病毒）和核酸代谢机制研究中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

(1) 抗病毒药物开发：作为先导化合物用于 HCV、HIV 等病毒抑制剂设计

(2) 分子探针：通过点击化学实现核酸-蛋白相互作用可视化研究

(3) 酶学机制研究：作为底物类似物解析聚合酶/糖基化酶的功能位点

(4) 放射性标记前体：叠氮基团可进一步衍生为同位素标记载体

4. 储存条件与使用建议

储存于-20℃干燥避光环境，开封后建议充氮保存。溶解时优先使用无核酸酶污染的 DMSO（浓度≤10mM），避免反复冻融。实验操作需在通风橱中进行，佩戴防尘口罩及丁腈手套。水溶液体系需现配现用，防止水解失效。

5. 质量控制与安全信息

经 HPLC（C18 柱，乙腈/水梯度洗脱）和质谱双重验证，批次间纯度偏差<2%。急性毒性数据（大鼠口服 LD50＞2000mg/kg），但叠氮基团遇热/摩擦可能分解产生剧

毒 HN3。废弃物需用 10%硫代硫酸钠溶液淬灭处理。运输分类为 UN2811（6.1 类危险品），须提供 MSDS 随货。

（注：本说明基于现有研究数据，实际应用需结合具体实验体系优化条件。）