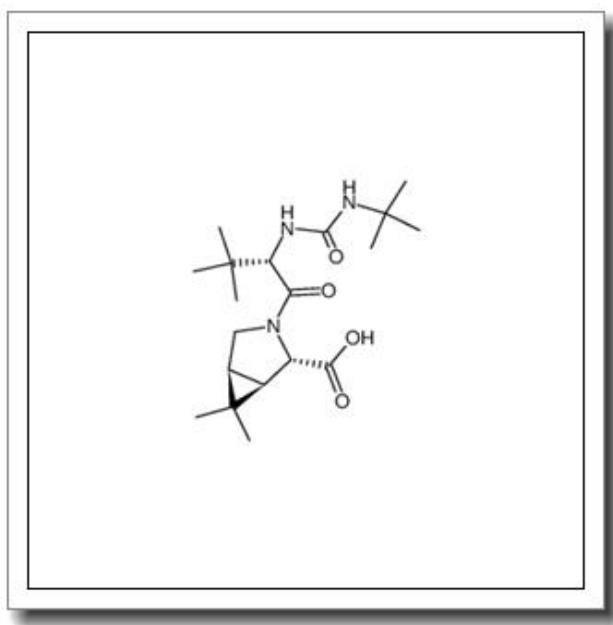


(1R,2S,5S)-3-[(2S)-2-[[[(叔丁基)氨基]羰基]氨基]-3,3-二甲基-1-氧代丁基]-6,6-二甲基-3-氮杂双环[3.1.0]己烷-2-羧酸

(1R, 2S, 5S)-3-((S)-2-(3-tert-butylureido)-3,3-dimethylbutanoyl)-6,6-dimethyl-3-azabicyclo[3.1.0]hexane-2-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	(1R, 2S, 5S)-3-((S)-2-(3-tert-butylureido)-3,3-dimethylbutanoyl)-6,6-dimethyl-3-azabicyclo[3.1.0]hexane-2-carboxylic acid
中文名称	(1R, 2S, 5S)-3-[(2S)-2-[[[(叔丁基)氨基]羰基]氨基]-3,3-二甲基-1-氧代丁基]-6,6-二甲基-3-氮杂双环[3.1.0]己烷-2-羧酸
CAS 号	816444-90-3

分子式	C ₁₉ H ₃₃ N ₃ O ₄
分子量	367.483
纯度	≥ 96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为(1R, 2S, 5S)-3-((S)-2-(3-tert-butylureido)-3,3-dimethylbutanoyl)-6,6-dimethyl-3-azabicyclo[3.1.0]hexane-2-carboxylic acid, 中文名称为(1R, 2S, 5S)-3-[(2S)-2-[[[(叔丁基)氨基]羰基]氨基]-3,3-二甲基-1-氧代丁基]-6,6-二甲基-3-氮杂双环[3.1.0]己烷-2-羧酸, CAS 号为 816444-90-3。其分子式为 C₁₉H₃₃N₃O₄, 分子量为 367.483, 纯度 ≥96%。该化合物具有独特的双环结构和手性中心, 属于高纯度有机合成中间体, 常温下为白色至类白色结晶性粉末, 易溶于极性有机溶剂如 DMSO 和甲醇, 微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

该分子通过其特异的叔丁基脲基团和双环结构, 可作为蛋白酶抑制剂或受体调节剂的核心骨架。其立体构型对生物活性具有关键影响, 尤其在药物设计中用于模拟天然肽类的构象限制。在酶学研究中, 它能选择性结合特定靶点, 抑制蛋白-蛋白相互作用, 因此在抗病毒和抗肿瘤药物开发领域具有潜在价值。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于药物研发领域, 特别是针对病毒蛋白酶(如 HCV NS3/4A)或细胞信号通路相关蛋白的小分子抑制剂设计。具体用途包括: 1) 作为先导化合物优化中的关键中间体; 2) 用于结构-活性关系(SAR)研究; 3) 在化学生物学中作为探针分子研究酶作用机制。此外, 也可用于手性催化剂的配体合成。

4. 储存条件与使用建议

建议储存于-20°C、避光、干燥的惰性气体环境中, 长期保存需置于真空密封容器。使用前需平衡至室温并避免反复冻融。溶解时建议先用 DMSO 配制成母液, 再稀释至工作浓度。操作时需在通风橱中进行, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。

5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC 检测纯度 ≥96%, MS 和 NMR 验证结构。安全数据表明: 1) 可能引起眼睛和皮肤刺激; 2) 吸入或误食有害; 3) 使用时应佩戴防护手套、护目镜和防尘口

罩。如发生接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合危险化学品处置规范。

（注：实际使用前请查阅最新版物质安全数据表 MSDS 并严格遵循实验室安全规程。）