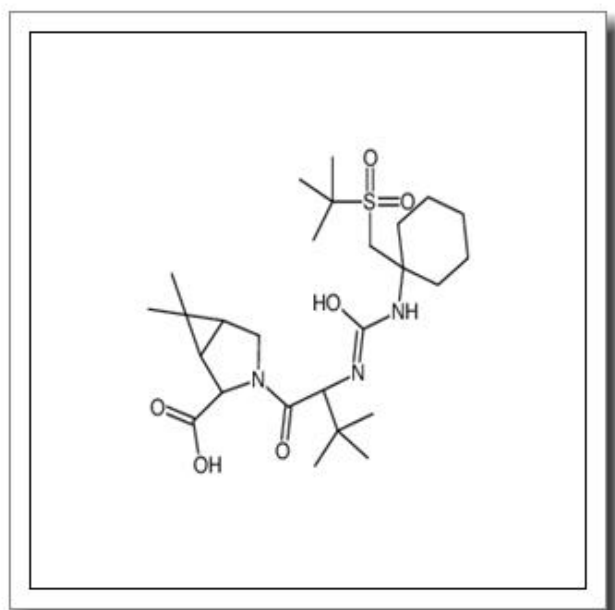


(1R,2S,5S)-6,6-Dimethyl-3-{3-methyl-N- [(1-[[(2-methyl-2-propanyl) sulfonyl]methyl}cyclohexyl)carbamoyl]- L-valyl}-3-azabicyclo[3.1.0]hexane-2- carboxylic acid

*(1R, 2S, 5S)-6, 6-Dimethyl-3-{3-methyl-N-[(1-[[(2-methyl-2-propanyl)
sulfonyl]methyl}cyclohexyl)carbamoyl]-L-valyl}-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)-6, 6-Dimethyl-3-{3-methyl-N-[(1-[[(2-methyl-2-propanyl) sulfonyl]methyl}cyclohexyl)carbamoyl]-L-valyl}-3-azabicyclo[3. 1. 0]hexane-2-carboxylic acid
中文名称	(1R, 2S, 5S)-6, 6-Dimethyl-3-{3-methyl-N-

	[(1-[(2-methyl-2-propanyl) sulfonyl]methyl)cyclohexyl) carbamoyl]-L-valyl}-3-azabicyclo[3.1.0]hexane-2-carboxylic acid
CAS 号	1229337-32-9
分子式	C ₂₆ H ₄₅ N ₃ O ₆ S
分子量	527.717
纯度	≥96%

产品说明

(1R, 2S, 5S) -6, 6-二甲基-3-{3-甲基-N-[(1-[(2-甲基-2-丙烷基)磺酰基]甲基)环己基)氨基甲酰基]-L-缬氨酰}-3-氮杂双环[3.1.0]己烷-2-羧酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为高纯度有机化合物，化学名称如标题所示，CAS 号为 1229337-32-9，分子式 C₂₆H₄₅N₃O₆S，分子量 527.717。其结构包含双环己烷骨架、缬氨酸衍生物片段及磺酰基修饰的环己基团，具有显著的空间位阻和手性特征。常温下为白色至类白色结晶性粉末，纯度 ≥96% (HPLC 验证)，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

该化合物是一种特异性蛋白酶抑制剂的设计中间体，其刚性双环结构和磺酰基修饰赋予其与靶酶活性位点的高亲和力。在药物研发中，此类结构常用于调节蛋白质-蛋白质相互作用，尤其在抗病毒和抗肿瘤领域具有潜在应用价值。其 L-缬氨酰片段增强了代谢稳定性，而磺酰基则优化了细胞膜穿透性。

3. 主要应用领域与具体用途

作为关键医药中间体，主要用于以下方向：

- 3.1 新型蛋白酶抑制剂的合成，特别是针对 HCV NS3/4A 或冠状病毒主蛋白酶的候选药物开发。
- 3.2 结构生物学研究中作为探针分子，用于解析酶催化机制。
- 3.3 手性催化剂或配体的合成前体，在不对称催化中发挥作用。

4. 储存条件与使用建议

- 4.1 储存：需避光密封保存于 -20℃ 干燥环境中，长期储存建议充氮保护。
- 4.2 复溶：推荐使用无水 DMSO 配制母液 (10-50 mM)，分装后避免反复冻融。
- 4.3 操作：在惰性气体环境下进行称量，佩戴防尘口罩及丁腈手套。

5. 质量控制与安全信息

- 5.1 质控标准：通过 HPLC (C18 柱，乙腈/水梯度洗脱) 和质谱双重验证，批间差

异 < 2%。

5.2 安全数据：急性毒性 LD50（大鼠口服） > 2000 mg/kg，但可能引起眼睛和皮肤刺激。

5.3 处置：废弃物料需按危险化学品处理，避免直接排放至水体或土壤。

注：本产品仅限科研用途，不适用于临床或食品领域。使用者应具备有机化合物操作资质，并参考最新版 Material Safety Data Sheet (MSDS) 执行相关防护措施。