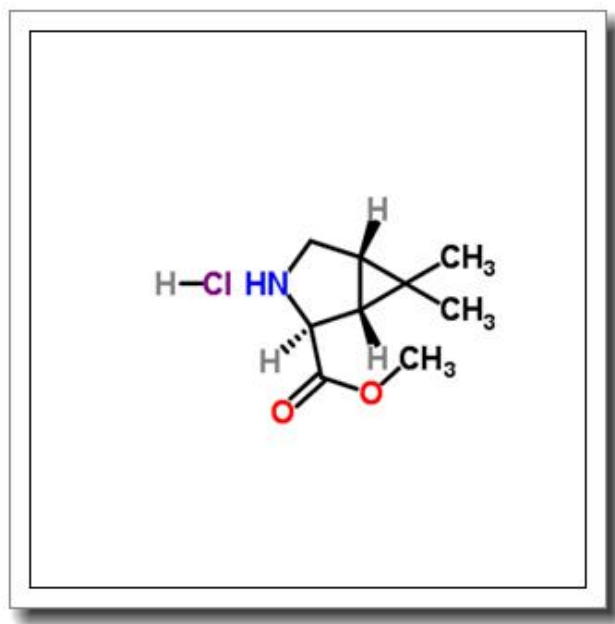


# 波普瑞韦中间体

*(1R, 2S, 5S)-Methyl 6,6-dimethyl-3-azabicyclo[3.1.0]hexane-2-carboxylate Hydrochloride*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	(1R, 2S, 5S)-Methyl 6,6-dimethyl-3-azabicyclo[3.1.0]hexane-2-carboxylate Hydrochloride
中文名称	波普瑞韦中间体
CAS 号	565456-77-1
分子式	C <sub>9</sub> H <sub>16</sub> N <sub>1</sub> O <sub>2</sub>
分子量	205.682
纯度	≥96%

## 产品说明

### 1. 产品概述与化学特性

(1R, 2S, 5S)-Methyl 6,6-dimethyl-3-azabicyclo[3.1.0]hexane-2-carboxylate Hydrochloride (波普瑞韦中间体) 是一种重要的杂环化合物, CAS 号为 565456-77-1, 分子式为 C<sub>9</sub>H<sub>16</sub>C<sub>1</sub>N<sub>0</sub>O<sub>2</sub>, 分子量为 205.682。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 纯度 ≥96%, 具有独特的双环[3.1.0]己烷骨架结构, 其立体构型(1R, 2S, 5S) 在药物合成中具有关键作用。盐酸盐形式增强了其水溶性和稳定性, 适合进一步化学修饰。

### 2. 生物化学功能与重要性

作为波普瑞韦 (Boceprevir) 的关键合成中间体, 该化合物通过抑制 HCV NS3/4A 蛋白酶活性, 直接参与抗丙型肝炎病毒药物的制备。其刚性双环结构能够高效模拟蛋白酶底物过渡态, 从而阻断病毒多肽链的加工, 展现出显著的抗病毒潜力。在药物化学领域, 此类中间体的立体选择性合成是确保最终药物活性的核心环节。

### 3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于抗病毒药物研发, 尤其是丙型肝炎治疗药物波普瑞韦的工业化生产。在实验室研究中, 可作为手性合成子用于构建复杂杂环体系, 或作为蛋白酶抑制剂类化合物的结构模板。此外, 在药物代谢研究、晶体学分析及结构-活性关系 (SAR) 优化中也有广泛应用。

### 4. 储存条件与使用建议

建议在 2-8°C 干燥避光条件下保存, 长期储存需充惰性气体保护。开封后需密封防潮, 避免反复冻融。使用时应在通风橱中操作, 佩戴防护手套和护目镜。溶解性测试表明其易溶于甲醇、DMSO 等极性有机溶剂, 水溶液需现配现用以防止水解。

### 5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC、NMR 和质谱严格检测, 符合药物中间体标准。安全数据表 (SDS) 显示其具有刺激性, 接触皮肤或眼睛需立即用大量清水冲洗。废弃物应作为有害化学

品处理，遵守当地环保法规。运输分类为 UN2811（6.1 类），需贴注“有毒物质”标识。研究人员应查阅详细毒理学数据（LD50 等）并制定应急预案。