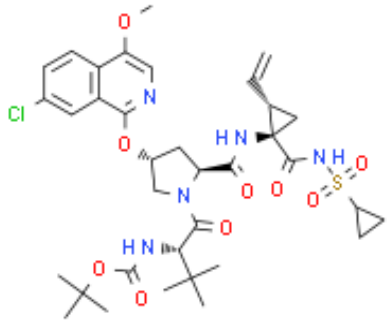
Product Data Sheet

Cas No.:	630420-16-5	Cat. No:	PC15619
Product Name:	Asunaprevir (BMS-650032)		
Product synonym:	阿那匹韦;(1R,2S)-N-[(1,1-二甲基乙氧基)羰基]-3-甲基-L-缬氨酰-(4R)-4-[(7;(1R,2S)-N-[(1,1-二甲基乙氧基)羰基]-3-甲基-L-缬氨酰-(4R)-4-[(7-氯-4-甲氧基-1-异喹啉基)氧基]-L-脯氨酰-1-氨基-N-(环丙基磺酰基)-2-乙烯基环丙基甲酰胺;阿拉匹韦		
Chemical name:	Asunaprevir (BMS-650032)		
MF:	C35H46CLN5O9S	FW:	748.2858
Purity:	≥98%	Batch No.:	-
Storage:			
Structural formula:			
λmax:	-	Formulation:	-
Solubility :			
SMILES :	ClC1C([H])=C([H])C2C(=C([H])N=C(C=2C=1[H])O[C@@]1([H])C([H])([H])N(C([C@]([H])(C(C([H])([H])[H])(C([H])([H])[H])C([H])([H])[H])C([H])([H])[H])N([H])C(=O)OC(C([H])([H])[H])(C([H])([H])[H])C([H])([H])[H])=O)[C@@]([H])(C1([H])[H])C(N([H])[C@]1(C(N([H])S(C2([H])C([H])([H])C2([H])[H])(=O)=O)=O)C([H])([H])[C@@]1([H])C([H])=C([H])[H])=O)OC([H])([H])[H]		
InChI Code:	-		
InChI Key:			
WARNING This product is not for human or veterinary use.			

Product Description

NS3蛋白酶抑制剂，Asunaprevir 是一种有效的 hepatitis C virus (HCV) NS3 protease 抑制剂，IC50 值为 0.2 nM-3.5 nM。

生物活性	Asunaprevir (BMS-650032) is a potent and orally bioavailable **hepatitis C virus (HCV) NS3 protease** inhibitor, with **IC_{50}** of 0.2 nM-3.5 nM. Asunaprevir inhibits SARS-CoV-2 3CL activity.
IC50 & Target[1][2]	IC50: 0.2 nM-3.5 nM (HCV NS3 protease)

体外研究(In Vitro)	In multiple experiments, populations of resistant colonies are markedly reduced when cells are treated with a combination of DCV and Asunaprevir. Asunaprevir (ASV) inhibits the NS3 proteolytic activity of genotype 1a (H77 strain) and genotype 1b (J4L6S strain), with IC_{50}s of 0.7 and 0.3 nM, respectively. The EC_{50}s of ASV against replicons encoding the NS3 protease domains representing genotypes 1a, 1b, and 4a, range from 1.2 to 4.0 nM. Replicon cells are maintained under selective pressure with asunaprevir at concentrations of 10 and 30 times the EC_{50} values (50 or 150 nM final concentrations, respectively). For genotype 1b resistance selection, replicon cells are maintained in the presence of asunaprevir at 10 or 30 times the EC_{50} values (30 or 90 nM final concentrations, respectively). Asunaprevir, administered at single or multiple doses of 200 to 600 mg twice daily, is generally well tolerated, achieving rapid and substantial decreases in HCV RNA levels in subjects chronically infected with genotype 1 HCV. **Medlife has not independently confirmed the accuracy of these methods. They are for reference only.**
体内研究(In Vivo)	Asunaprevir (ASV, 3-15 mg/kg, p.o.) displays a hepatotropic disposition (liver-to-plasma ratios ranging from 40- to 359-fold across species) in several animal species. Twenty-four hours postdose, liver exposures across all species tested are ≥110-fold above the inhibitor EC_{50} observed with HCV genotype-1 replicons. **Medlife has not independently confirmed the accuracy of these methods. They are for reference only.**

包装储存

Powder	**-20°C**	3 years
	4°C	2 years
In solvent	**-80°C**	6 months
	-20°C	1 month

体外研究:

DMSO : ≥ 100 mg/mL (133.64 mM)

Ethanol : 20 mg/mL (26.73 mM; Need ultrasonic)

* "≥" means soluble, but saturation unknown.

配制储备溶液	质量 溶剂体积 浓度	1 mg	5 mg	10 mg
	1 mM	1.3364 mL	6.6819 mL	13.3638 mL
	5 mM	0.2673 mL	1.3364 mL	2.6728 mL
	10 mM	0.1336 mL	0.6682 mL	1.3364 mL

* 产品不同，其溶解度不同。建议根据产品选择合适的溶剂配制储备溶液；配成溶液后，**建议分装保存，避免反复冻融造成的产品失效**。
  储备液的保存方式和期限： -80°C, 6 months; -20°C, 1 month。-80°C 储存时，建议在 6 个月内使用，-20°C 储存时，建议在 1 个月内使用。

体内研究:

建议根据您的实验动物和给药方式选择适当的溶解方案。以下溶解方案都建议先按照 **体外研究** 方式配制澄清的储备液，再依次添加助溶剂：

——为保证实验结果的可靠性，**澄清的储备液可以根据储存条件，适当保存**；体内实验的工作液，**建议您现用现配，当天使用**； 以下溶剂前显示的百
分比是指**该溶剂在您配制终溶液中的体积占比**；如在配制过程中出现沉淀、析出现象，可以通过**加热和/或超声的**

溶解度数据	**方式助溶** 1. 建议依照次序添加每种溶剂： 10% DMSO 40% PEG300 5% Tween-80 45% saline Solubility: ≥ 2.5 mg/mL (3.34 mM); Clear solution 此方案可获得 ≥ 2.5 mg/mL (3.34 mM，饱和度未知) 的澄清溶液。 以 1 mL 工作液为例，取 100 μL 25.0 mg/mL 的澄清 DMSO 储备液加到 400 μL PEG300 中，混合均匀；向上述体系中加入50 μL Tween-80，混合均匀；然后继续加入 450 μL生理盐水定容至 1 mL。 将 0.9 g 氯化钠，完全溶解于 100 mL ddH?O 中，得到澄清透明的生理盐水溶液 2. 建议依照次序添加每种溶剂： 10% DMSO 90% (20% SBE-β-CD in saline) Solubility: ≥ 2.5 mg/mL (3.34 mM); Clear solution 此方案可获得 ≥ 2.5 mg/mL (3.34 mM，饱和度未知) 的澄清溶液。 以 1 mL 工作液为例，取 100 μL 25.0 mg/mL 的澄清 DMSO 储备液加到 900 μL 20% 的 SBE-β-CD 生理盐水水溶液中，混合均匀。 将 2 g 磺丁基醚 β-环糊精加入 5 mL 生理盐水中，再用生理盐水定容至 10 mL，完全溶解，澄清透明 3. 建议依照次序添加每种溶剂： 10% DMSO 90% corn oil Solubility: ≥ 2.5 mg/mL (3.34 mM); Clear solution 此方案可获得 ≥ 2.5 mg/mL (3.34 mM，饱和度未知) 的澄清溶液，此方案不适用于实验周期在半个月以上的实验。 以 1 mL 工作液为例，取 100 μL 25.0 mg/mL 的澄清 DMSO 储备液加到 900 μL玉米油中，混合均匀。 4. 建议依照次序添加每种溶剂： 5% DMSO 40% PEG300 5% Tween-80 50% saline Solubility: 2.5 mg/mL (3.34 mM); Suspended solution; Need ultrasonic 5. 建议依照次序添加每种溶剂： 10% EtOH 40% PEG300 5% Tween-80 45% saline Solubility: 2 mg/mL (2.67 mM); Clear solution; Need ultrasonic 此方案可获得 2 mg/mL (2.67 mM) 的澄清溶液。 以 1 mL 工作液为例，取 100 μL 20.0 mg/mL 的澄清 EtOH 储备液加到 400 μL PEG300 中，混合均匀；向上述体系中加入50 μL Tween-80，混合均匀；然后继续加入 450 μL生理盐水定容至 1 mL。 将 0.9 g 氯化钠，完全溶解于 100 mL ddH?O 中，得到澄清透明的生理盐水溶液 6. 建议依照次序添加每种溶剂： 10% EtOH 90% corn oil Solubility: ≥ 2 mg/mL (2.67 mM); Clear solution 此方案可获得 ≥ 2 mg/mL (2.67 mM，饱和度未知) 的澄清溶液，此方案不适用于实验周期在半个月以上的实验。 以 1 mL 工作液为例，取 100 μL 20.0 mg/mL 的澄清 EtOH 储备液加到 900 μL玉米油中，混合均匀。 *