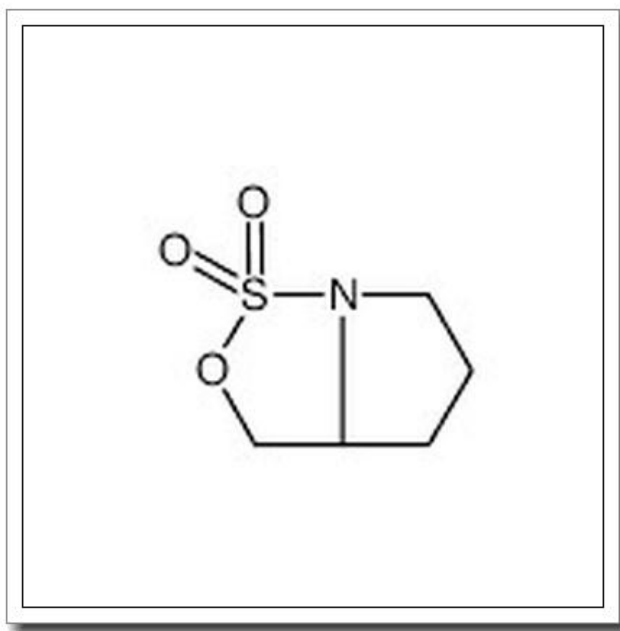


(R)-四氢-3H-吡咯并[1,2-c][1,2,3]恶噻唑-1,1-二氧化物

(3aR)-3a, 4, 5, 6-tetrahydro-3H-pyrrolo[1,2-c]oxathiazole 1,1-dioxide



产品基本信息

属性	值
化学名称	(3aR)-3a, 4, 5, 6-tetrahydro-3H-pyrrolo[1,2-c]oxathiazole 1,1-dioxide
中文名称	(R)-四氢-3H-吡咯并[1,2-c][1,2,3]恶噻唑-1,1-二氧化物
CAS 号	143577-46-2
分子式	C ₅ H ₉ N ₃ O ₃ S
分子量	163.195
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

(3aR)-3a, 4, 5, 6-四氢-3H-吡咯并[1, 2-c]恶噻唑-1, 1-二氧化物 (CAS 号: 143577-46-2) 是一种具有光学活性的杂环化合物, 分子式为 C₅H₉N₀S₃, 分子量为 163.195。该化合物属于恶噻唑类衍生物, 结构中包含吡咯环与恶噻唑环的稠合体系, 并以二氧化硫基团修饰。其纯度高于 96%, 外观通常为白色至类白色结晶或粉末, 具有明确的立体构型 (R 构型), 在有机合成和药物化学中具有重要价值。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物可作为手性合成子或中间体, 参与不对称合成反应, 尤其适用于构建含硫或氮杂环的药物分子。其恶噻唑二氧化物结构表现出独特的电子效应和空间位阻, 能够调控反应的选择性。在生物活性分子设计中, 此类结构常与靶标蛋白的硫醇或氨基基团发生特异性相互作用, 潜在应用于酶抑制剂或受体调节剂的开发。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发领域, 本产品常用于抗肿瘤、抗感染或神经系统药物的先导化合物优化。例如, 作为蛋白酶体抑制剂或抗菌剂的核心片段。此外, 在材料科学中, 可用于合成功能性高分子或液晶材料的单体。实验室中亦用作手性配体或催化剂的前体, 助力复杂分子的立体选择性合成。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C 下避光保存, 置于干燥惰性气体 (如氮气) 环境中以延长稳定性。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极性有机溶剂 (如 DMSO、甲醇), 水溶性较低, 配制溶液时需根据实验需求选择适当溶剂。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC、NMR 和质谱进行严格质量控制, 确保批次间一致性。安全数据表明, 其急性毒性较低 (LD₅₀ 未明确), 但仍可能对皮肤、眼睛和呼吸系统产生刺

激。操作时应避免吸入粉尘或直接接触，若意外暴露需用大量清水冲洗并及时就医。废弃物处置需符合当地化学品管理法规，不可随意排放。