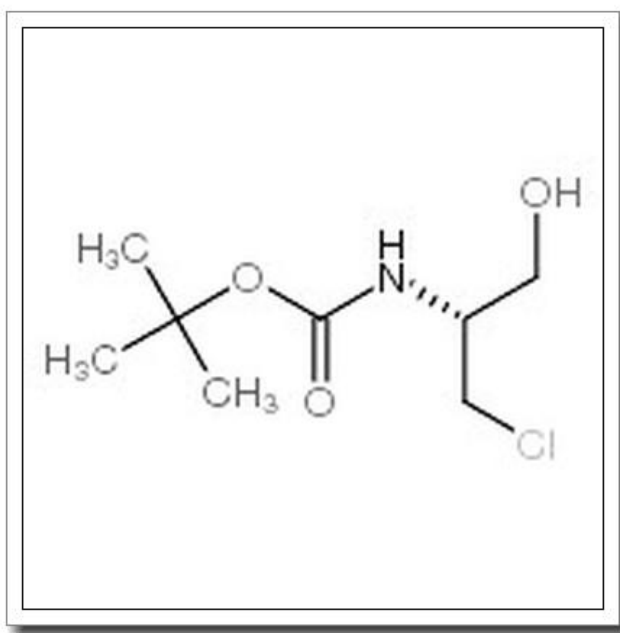


[(1R)-2-氯-1-(羟基甲基)乙基]-氨基甲酸叔丁酯

tert-butyl N-[(2R)-1-chloro-3-hydroxypropan-2-yl]carbamate



产品基本信息

属性	值
化学名称	<i>tert-butyl N-[(2R)-1-chloro-3-hydroxypropan-2-yl]carbamate</i>
中文名称	[(1R)-2-氯-1-(羟基甲基)乙基]-氨基甲酸叔丁酯
CAS 号	651035-90-4
分子式	C ₈ H ₁₆ ClN ₃ O ₃
分子量	209.671
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 tert-butyl N-[(2R)-1-chloro-3-hydroxypropan-2-yl]carbamate ([(1R)-2-氯-1-(羟基甲基) 乙基]-氨基甲酸叔丁酯)，CAS 号 651035-90-4，分子式 C₈H₁₆ClN₁O₃，分子量 209.671。其结构中包含叔丁氧羰基 (Boc) 保护基团、氯代羟基丙基活性位点及手性中心 (R 构型)，纯度经 HPLC 验证 ≥96%。该化合物在极性有机溶剂 (如甲醇、二氯甲烷) 中溶解性良好，但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

作为手性砌块和医药中间体，其 Boc 保护基可在酸性条件下选择性脱除，而氯原子与羟基为后续衍生化反应 (如亲核取代、酯化) 提供关键位点。该分子在 β-氨基醇类化合物合成中具有重要价值，尤其适用于蛋白酶抑制剂、抗菌剂等活性分子的结构修饰。

3. 主要应用领域与具体用途

本品广泛应用于药物研发领域：

- (1) 抗病毒药物 (如 HIV 蛋白酶抑制剂) 的中间体合成
- (2) β-内酰胺类抗生素侧链修饰
- (3) 手性催化剂配体的制备
- (4) 多肽固相合成中氨基的保护与去保护反应

4. 储存条件与使用建议

推荐避光密封保存于 -20℃ 干燥环境中，有效期 24 个月。使用时需在惰性气体 (如氮气) 保护下操作，避免接触强氧化剂或强酸。溶解建议采用无水 DMF 或 THF，反应温度不宜超过 60℃ 以防止 Boc 基团分解。

5. 质量控制与安全信息

通过 GC-MS 和核磁共振 (1H/13C NMR) 进行结构确证，残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。安全数据：

- 危害标识: H315 (皮肤刺激)、H319 (眼刺激)
- 防护措施: 佩戴防尘口罩、化学护目镜及丁腈手套
- 应急处理: 皮肤接触时立即用肥皂水冲洗, 眼部接触需用生理盐水冲洗 15 分钟
- 废弃物处置: 按危险化学品规范处理

注: 本产品仅供科研用途, 不适用于药品、食品或家庭使用。