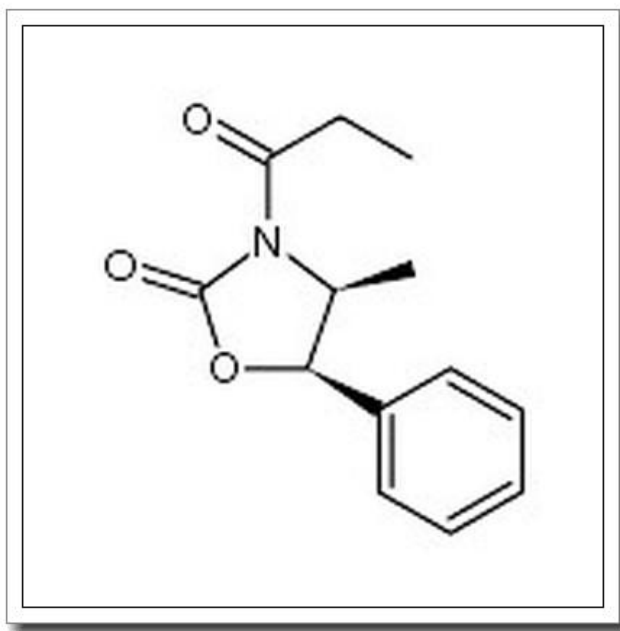


(4S,5R)-3-丙酰基-4-甲基-5-苯基-2-噁唑烷酮

(4S, 5R)-4-Methyl-5-phenyl-3-propionyl-2-oxazolidinone



产品基本信息

属性	值
化学名称	(4S, 5R)-4-Methyl-5-phenyl-3-propionyl-2-oxazolidinone
中文名称	(4S, 5R)-3-丙酰基-4-甲基-5-苯基-2-噁唑烷酮
CAS 号	143654-01-7
分子式	C ₁₃ H ₁₅ N ₃ O
分子量	233.263
纯度	>96%

产品说明

(4S, 5R)-3-丙酰基-4-甲基-5-苯基-2-噁唑烷酮产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为手性噁唑烷酮类化合物，化学名称(4S, 5R)-4-Methyl-5-phenyl-3-propionyl-2-oxazolidinone, CAS 号 143654-01-7, 分子式 C₁₃H₁₅N₃O₃, 分子量 233.263。外观通常为白色至类白色结晶性粉末，纯度≥96% (HPLC)。其结构中含有的噁唑烷酮环与苯基、丙酰基共同构成独特的手性中心，在极性有机溶剂（如乙醇、乙腈）中具有良好溶解性，而在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为手性助剂和中间体，在不对称合成中表现出显著价值。其刚性环状结构可有效诱导立体选择性反应，特别是作为 Evans 辅基用于醛醇缩合、烷基化等关键步骤。苯基与丙酰基的空间位阻效应增强了反应的对映选择性，在构建 α-手性羧酸衍生物时具有不可替代的作用。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药和精细化学品合成领域：

- 手性药物合成：用于 β-内酰胺类抗生素、抗肿瘤药物及蛋白酶抑制剂的手性侧链构建
- 有机催化：作为金属配体的前体或催化剂修饰剂
- 材料科学：参与液晶材料单体的不对称合成

典型反应包括：与醛类发生立体选择性烷基化、作为酰亚胺模板进行亲核加成等。

4. 储存条件与使用建议

储存于密封容器中，避光保存于-20℃至 4℃干燥环境，长期储存建议充氮保护。使用前需恢复至室温并保持环境干燥，避免接触强氧化剂。推荐在惰性气体保护下进行反应操作，溶剂需经脱水脱氧处理以保持稳定性。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC、NMR 和质谱进行批次质量控制，残留溶剂符合 ICH 标准。安全数据：

- 危害标识: 刺激性物质 (皮肤接触可能引起红肿)
- 操作防护: 需佩戴化学护目镜、丁腈手套及防尘口罩
- 应急处理: 皮肤接触时立即用大量清水冲洗 15 分钟
- 废弃物处置: 按危险化学品规范处理, 禁止直接排入环境

本产品仅限科研用途, 不适用于医药或食品领域。具体应用前请查阅最新文献并开展小试实验验证反应条件。