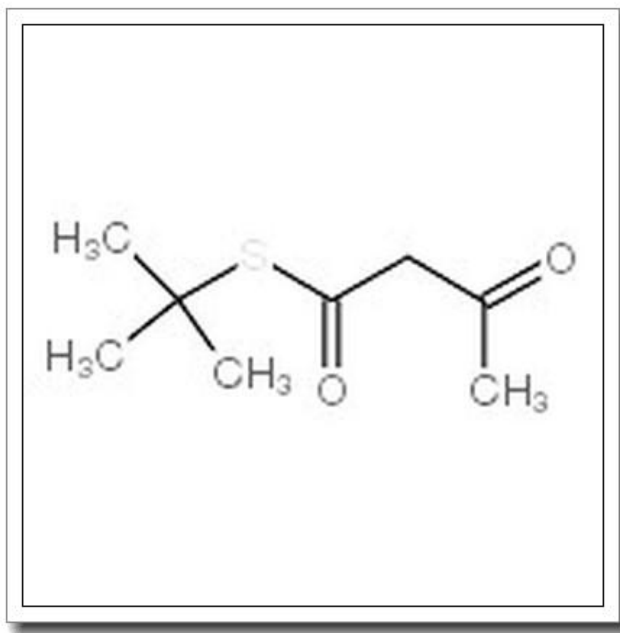


乙酰硫代乙酸 S-叔丁酯

S-tert-butyl 3-oxobutanethioate



产品基本信息

属性	值
化学名称	S-tert-butyl 3-oxobutanethioate
中文名称	乙酰硫代乙酸 S-叔丁酯
CAS 号	15925-47-0
分子式	C ₈ H ₁₄ O ₂ S
分子量	174.261
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

S-tert-butyl 3-oxobutanethioate (乙酰硫代乙酸 S-叔丁酯) 是一种有机硫化合物, 化学式为 C₈H₁₄O₂S, 分子量为 174.261。该化合物以无色至淡黄色液体形式存在, 具有特征性气味。其 CAS 号为 15925-47-0, 纯度通常高于 96%。该分子结构包含一个硫代酯基团和一个酮基, 使其在有机合成中表现出独特的反应活性。其叔丁基部分提供了空间位阻效应, 可影响反应的选择性。

2. 生物化学功能与重要性

乙酰硫代乙酸 S-叔丁酯在生物化学领域主要作为硫酯类化合物的模型分子或中间体。硫酯键在生物体内广泛存在, 例如在辅酶 A 衍生物中, 因此该化合物可用于模拟相关生物化学反应。其酮基和硫酯基团的协同作用使其成为研究酶催化机制或代谢途径的工具分子。此外, 其在药物合成中可作为前体, 用于构建含硫杂环或硫代羧酸衍生物。

3. 主要应用领域与具体用途

该化合物主要用于有机合成和药物研发领域。在有机合成中, 它是构建复杂分子的关键中间体, 特别适用于含硫药物的合成, 如抗生素或抗炎药物。在材料科学中, 可用于制备功能性高分子或配位聚合物。此外, 在生化研究中, 它可作为探针分子用于研究硫酯酶或转移酶的活性。具体应用包括但不限于: 多肽修饰、金属配合物合成以及生物正交化学研究。

4. 储存条件与使用建议

建议将本品储存于 2-8° C 的干燥环境中, 避免光照和潮湿。长期保存应充入惰性气体 (如氮气) 以延长稳定性。使用前需恢复至室温并充分摇匀。操作时应在通风良好的环境下进行, 并佩戴适当的防护装备 (如手套、护目镜)。该化合物对湿气敏感, 反应体系中需严格除水。开封后建议尽快使用, 剩余部分应密封保存。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和 NMR 双重验证, 确保纯度 >96%。可能存在的杂质包括水解产物

（硫代羧酸）或氧化衍生物。安全数据表明，该化合物具有刺激性，可能引起皮肤和眼睛不适。若不慎接触，应立即用大量清水冲洗并就医。废弃处理需遵循当地化学品处置法规，不可直接排入下水道。运输时需归类为一般化学品，避免与强氧化剂混装。