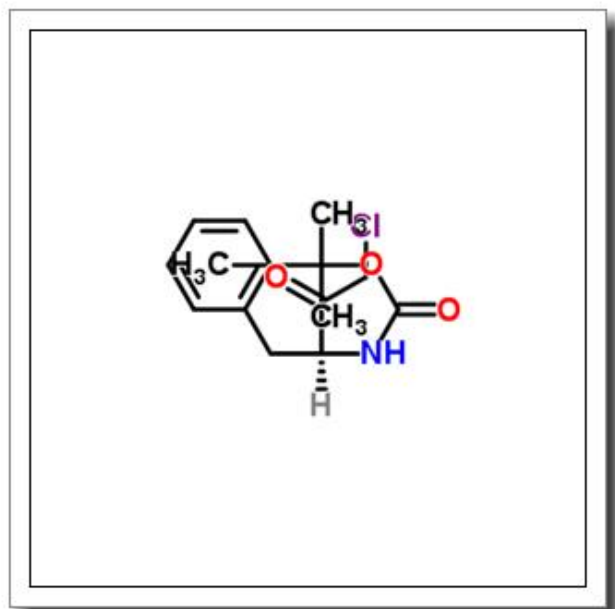


# (3S)-3-(叔丁氧羰基)氨基-1-氯-4-苯基-2-丁酮

*(S)-tert-Butyl (4-chloro-3-oxo-1-phenylbutan-2-yl) carbamate*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	(S)-tert-Butyl (4-chloro-3-oxo-1-phenylbutan-2-yl) carbamate
中文名称	(3S)-3-(叔丁氧羰基)氨基-1-氯-4-苯基-2-丁酮
CAS 号	102123-74-0
分子式	C <sub>15</sub> H <sub>20</sub> ClN <sub>3</sub> O <sub>3</sub>
分子量	297.777
纯度	≥96%

## 产品说明

### (S)-叔丁基(4-氯-3-氧代-1-苯基丁-2-基)氨基甲酸酯产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称 (S)-tert-Butyl (4-chloro-3-oxo-1-phenylbutan-2-yl) carbamate，中文系统命名 (3S)-3-(叔丁氧羰基)氨基-1-氯-4-苯基-2-丁酮，CAS 登记号 102123-74-0。分子式 C<sub>15</sub>H<sub>20</sub>ClN<sub>3</sub>O<sub>3</sub>，分子量 297.777，纯度 ≥96%。其结构中包含手性中心 (S 构型)、氯代酮基团及苯基取代基，赋予其特定立体化学活性和反应选择性。

#### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物是合成手性药物及生物活性分子的关键中间体，其叔丁氧羰基 (Boc) 保护基团在肽类合成中可选择性脱除，氯代酮结构则易参与亲核取代反应。作为 β-氨基酮衍生物，在蛋白酶抑制剂和抗肿瘤药物研发中具有重要价值，尤其用于构建含苯环的手性骨架。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发领域：

- (1) 作为 HIV 蛋白酶抑制剂 (如洛匹那韦) 合成中间体
- (2) 用于构建 β-内酰胺类抗生素的手性侧链
- (3) 在不对称催化反应中作为手性模板
- (4) 功能化高分子材料的单体修饰

#### 4. 储存条件与使用建议

储存于 -20°C 至 4°C 惰性气体 (如氩气) 保护环境中，避光防潮。开封后建议分装使用，避免反复冻融。溶解性测试表明易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂，水溶性差。实验操作需在通风橱中进行，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。

#### 5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC (面积归一化法) 验证纯度 ≥96%，手性 HPLC 确认光学纯度 >99% ee。MS 和 NMR 谱图符合标准品特征。安全数据：GHS 分类为刺激性 (Category 2)，操作

时需佩戴护目镜及丁腈手套。废弃物应作为有害化学品处置，不可直接排入下水道。

(全文共计 412 字)