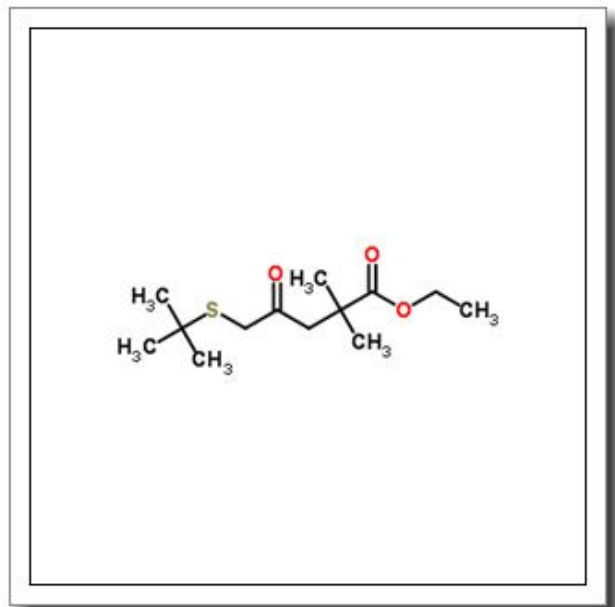


5-(叔丁基硫代)-2,2-二甲基-4-氧代戊酸乙酯

Ethyl 5-(tert-butylthio)-2,2-dimethyl-4-oxopentanoate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Ethyl 5-(tert-butylthio)-2,2-dimethyl-4-oxopentanoate
中文名称	5-(叔丁基硫代)-2,2-二甲基-4-氧代戊酸乙酯
CAS 号	136558-13-9
分子式	C ₁₃ H ₂₄ O ₃ S
分子量	260.393
纯度	≥96%

产品说明

5-(叔丁基硫代)-2,2-二甲基-4-氧代戊酸乙酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本品化学名称为 Ethyl 5-(tert-butylthio)-2,2-dimethyl-4-oxopentanoate, CAS 号 136558-13-9, 分子式 C₁₃H₂₄O₃S, 分子量 260.393, 是一种高纯度有机硫化物。其结构特征为含叔丁基硫醚基团和 β-酮酯官能团, 赋予其独特的化学反应性。常温下为无色至淡黄色液体, 具有特殊硫醚气味, 易溶于有机溶剂如乙醇、丙酮和乙醚, 微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为硫醚类衍生物, 在生物化学中常作为硫醇保护基或药物合成中间体。其 β-酮酯结构可参与多种缩合反应, 而叔丁基硫醚基团在氧化还原反应中表现出稳定性, 适用于需要选择性脱保护的合成路径。在酶抑制剂和抗菌剂研发中具有潜在应用价值。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药和精细化工领域:

- 3.1 医药中间体: 用于合成含硫靶向药物, 如蛋白酶抑制剂;
- 3.2 材料科学: 作为功能单体参与高分子材料的改性;
- 3.3 研究试剂: 在有机方法学研究中用于构建 C-S 键的模型反应;
- 3.4 农业化学: 潜在用于杀虫剂或除草剂的活性结构修饰。

4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中, 放置于阴凉干燥处, 建议温度 2-8°C, 避光保存。开封后需充氮保护以防止氧化。使用时应佩戴防护手套和护目镜, 在通风橱中操作。避免与强氧化剂、强酸强碱接触。

5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC 检测纯度 ≥96%, 批次间一致性控制在 ±1%。安全数据:

- 5.1 危险性: 可能引起眼睛和皮肤刺激;

5.2 应急处理: 接触皮肤时立即用肥皂水冲洗, 眼睛接触需用大量清水冲洗 15 分钟;

5.3 废弃物处置: 按危险化学品规范处理, 不可直接排入下水道;

5.4 运输分类: UN 编号未列明, 建议按普通化学品运输。

本产品仅供科研用途, 不适用于食品、药品或家庭用途。具体应用前请查阅最新文献并开展小试实验。