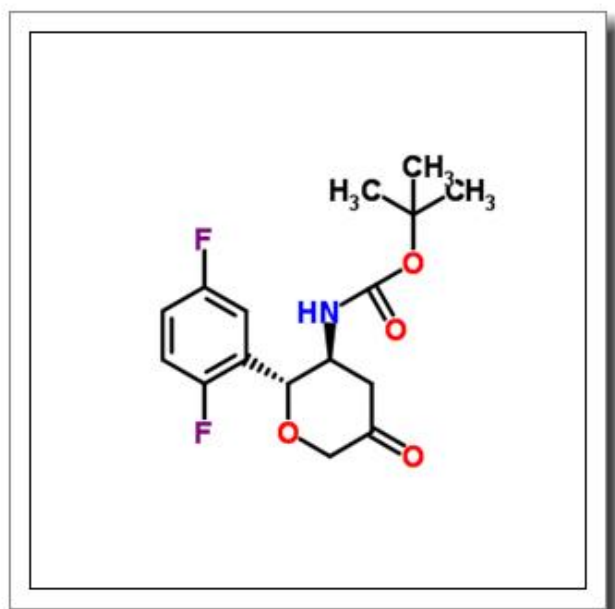


N-[(2R,3S)-2-(2,5-二氟苯基)四氢-5-氧代-2H-吡喃-3-基]氨基甲酸叔丁酯

N-[(2R, 3S)-2-(2, 5-Difluorophenyl) tetrahydro-5-oxo-2H-pyran-3-yl]carbamic acid 1,1-dimethylethyl ester



产品基本信息

属性	值
化学名称	N-[(2R, 3S)-2-(2, 5-Difluorophenyl) tetrahydro-5-oxo-2H-pyran-3-yl]carbamic acid 1,1-dimethylethyl ester
中文名称	N-[(2R, 3S)-2-(2, 5-二氟苯基)四氢-5-氧代-2H-吡喃-3-基]氨基甲酸叔丁酯
CAS 号	951127-25-6
分子式	C ₁₆ H ₁₉ F ₂ N ₁ O ₄
分子量	327. 323
纯度	≥ 96%

产品说明

N-[(2R, 3S)-2-(2, 5-二氟苯基)四氢-5-氧代-2H-吡喃-3-基]氨基甲酸叔丁酯 (CAS 号: 951127-25-6) 是一种高纯度有机化合物, 分子式为 C₁₆H₁₉F₂N₂O₄, 分子量为 327.323。该化合物具有特定的立体构型 (2R, 3S), 结构中包含二氟苯基、四氢吡喃环和叔丁氧羰基 (Boc) 保护基团, 是一种重要的手性中间体。其纯度通常 ≥96%, 适合用于精细化学合成和药物研发。

1. 产品概述与化学特性

该化合物为白色至类白色结晶或粉末, 具有明确的立体化学结构。其分子中的 Boc 保护基团在酸性条件下可脱除, 而二氟苯基和吡喃酮结构赋予其独特的电子效应和空间位阻, 使其在不对称合成中表现出高反应选择性。

2. 生物化学功能与重要性

作为手性构建单元, 该化合物在药物化学中常用于合成蛋白酶抑制剂或激酶抑制剂的核心骨架。其结构中的氟原子可增强化合物的代谢稳定性和生物膜穿透性, 因此在抗病毒或抗肿瘤药物研发中具有潜在价值。

3. 主要应用领域与具体用途

- 医药中间体: 用于合成含氟手性药物, 如 HIV 蛋白酶抑制剂或抗癌候选化合物。
- 不对称催化: 作为配体或底物参与立体选择性反应。
- 学术研究: 用于探索氟代芳香环对药物活性的影响机制。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C 下避光保存, 干燥惰性气体环境中密封存放。使用前需恢复至室温并避免接触湿气。溶解性测试表明其易溶于二氯甲烷、DMF 等有机溶剂, 实验操作应在通风橱中进行。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC 和 NMR 确保纯度 ≥96%, 批次间稳定性良好。安全数据表明该化合物可能对眼睛和皮肤有刺激性, 操作时需佩戴防护装备。废弃物应按照国家有机卤化物标准处理。

本产品仅供科研用途，不适用于临床或食品领域。具体应用需结合实验设计进一步验证其适用性。