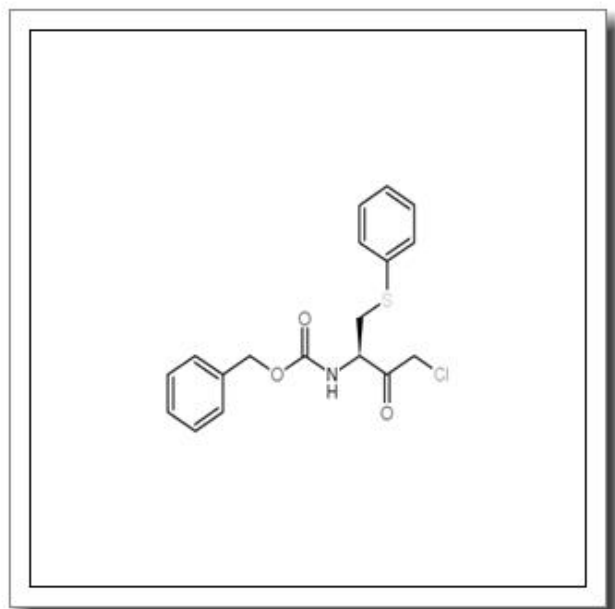


(R)-(-)-3-(苄氧羰基氨基)-1-氯-4-苯硫基-2-丁酮

benzyl N-[(2R)-4-chloro-3-oxo-1-phenylsulfanylbutan-2-yl]carbamate



产品基本信息

属性	值
化学名称	benzyl N-[(2R)-4-chloro-3-oxo-1-phenylsulfanylbutan-2-yl]carbamate
中文名称	(R)-(-)-3-(苄氧羰基氨基)-1-氯-4-苯硫基-2-丁酮
CAS 号	159878-01-0
分子式	C ₁₈ H ₁₈ ClN ₁ O ₃ S
分子量	363.858
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本产品为(R)-(-)-3-(苄氧羰基氨基)-1-氯-4-苯硫基-2-丁酮(化学名称: benzyl N-[(2R)-4-chloro-3-oxo-1-phenylsulfanylbutan-2-yl]carbamate), CAS 号为 159878-01-0, 分子式为 C₁₈H₁₈ClN₁O₃S, 分子量为 363.858。该化合物是一种手性有机硫化物, 纯度≥96%, 常温下呈白色至类白色结晶或粉末状。其结构中包含氯代酮、苯硫基和苄氧羰基氨基等官能团, 具有显著的立体选择性和反应活性, 适用于不对称合成及药物中间体制备。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为手性砌块(chiral building block), 在生物化学领域主要用于蛋白酶抑制剂和肽类药物的合成。其氯代酮结构可参与亲核取代反应, 而苄氧羰基氨基(Cbz)作为保护基团, 能选择性保护胺基, 避免副反应发生。在药物研发中, 其(R)-构型对特定靶点的结合效率具有关键影响, 常用于抗病毒和抗肿瘤先导化合物的结构优化。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品广泛应用于医药研发和有机合成领域, 具体用途包括:

1. 作为 HIV 蛋白酶抑制剂或凝血酶抑制剂的合成中间体;
2. 用于构建含硫手性中心的β-氨基酸衍生物;
3. 在不对称催化反应中作为底物或配体;
4. 参与多肽固相合成中的选择性保护与脱保护步骤。

4. 储存条件与使用建议

建议在-20°C下避光密封保存, 长期储存需充惰性气体保护。开封后需在干燥环境中尽快使用, 避免反复冻融。使用时需在通风橱中操作, 佩戴防护手套和护目镜。溶解性测试表明, 该产品易溶于二氯甲烷、DMF等有机溶剂, 微溶于甲醇, 不溶于水。建议使用前通过TLC或HPLC验证纯度。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。安全数据表明，其急性毒性 (LD50) 为 300 mg/kg (大鼠口服)，属于有害物质，接触后可能引起皮肤刺激和眼部损伤。废弃处理需遵循危险化学品处置规范，严禁直接排放至环境中。实验过程中如发生泄漏，应立即用惰性吸附材料覆盖并收集至专用容器。

注：以上信息基于现有研究数据，具体应用需结合实验条件进一步验证。