



本PDF文件由 爱化学 IChemistry.cn 免费提供, 全部信息请点击[121961-22-6](#), 若要查询其它化学品请登录[CAS号查询网](#)

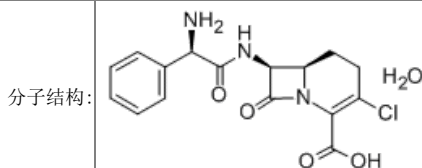
如果您觉得本站对您的学习工作有帮助, 请与您的朋友一起分享:) [爱化学www.ichemistry.cn](#)

CAS Number:121961-22-6 基本信息

中文名: 7-[(氨苯基乙酰基)氨基]-3-氯-8-氧代-1-氮杂二环[4.2.0]辛-2-烯-2-羧酸水合物;  
7-[(氨苯基乙酰基)氨基]-3-氯

英文名: LORACARBEF (200 MG)

别名: 7-((aminophenylacetyl)amino)-3-l-azabicyclo(4.2.0)oct-2-ene-2-carboxylic acid;  
kt3777;  
ly163892;  
monohydrate, (6r-(6-alpha, 7-beta(r\*))) -chloro-8-oxo;  
LORACARBEF (200 MG);  
1-Azabicyclo4.2.0oct-2-ene-2-carboxylic acid, 7-(2R)-aminophenylacetyl-amino-3-chloro-8-oxo-,  
monohydrate, (6R, 7S)-;  
[6R-[6 $\alpha$ , 7f1(R $^{\wedge}$ )]]-7-[(Aminophenylacetyl)amino]-3-chloro-8-oxo-1-azabicyclo[4.2.0]oct-2-ene-2-  
carboxylic acid monohydrate;  
Carbacefaclo



分子式: C<sub>16</sub>H<sub>16</sub>ClN<sub>3</sub>O<sub>4</sub>·H<sub>2</sub>O

分子量: 367.784

CAS登录号: 121961-22-6

物理化学性质

性质描述: 熔点205~215°C(分解)。[ $\alpha$ ]<sub>D</sub><sup>21</sup>+34.0° (C=0.35, 水)。

CAS#121961-22-6化学试剂供应商(点击生产商链接可查看价格)

供应商信息已更新, 请登录爱化学 [CAS No. 121961-22-6](#) 查看

若您在此化学品供应商, 请按照[化工产品收录](#)说明进行免费添加

其他信息

产品应用: 其抗菌活性和头孢克罗、头孢呋新酯相似, 用于由敏感菌所引起的肺炎、咽喉炎、慢性支气管炎、轻至中度急性支气管炎的继发性细菌感染、扁桃腺炎等。

生产方法及其他: 方法1: 528mg化合物(I)溶于15ml无水苯, 加入0.2rn1苯硫酚和0.2ml哌啶, 在室温下搅拌2h。用10%柠檬酸水溶液和饱和盐水洗, 干燥, 减压浓缩。油状的剩余物用硅胶柱层析, 己烷-乙酸乙酯(4: 1)洗脱, 得720mg化合物(II), 收率96.3%, 熔点77.5~78°C。  
480mg化合物(II)溶于50ml蒸馏过的氯仿, 在冰浴冷却下, 加入240mg间氯过苯甲酸(m-CPBA)。在0°C下搅拌30min后, 反应液用饱和碳酸氢钠溶液和饱和盐水洗, 干燥, 浓缩得500mg化合物(III), 收率99.9%, 熔点95.5~96.5°C。  
109mg化合物(III)和23.5mg氯化钙悬浮于1ml二氯甲烷, 在0°C下加入27 $\mu$ l硫酰氯。并在0°C下搅拌1h。反应液依次用10%柠檬酸溶液、饱和碳酸氢钠和饱和盐水洗, 干燥, 浓缩。剩余物用硅胶柱层析, 己烷-乙酸乙酯(5: 1)洗脱, 得66.5mg油状的化合物(IV), 收率56.1%。

1. 3g化合物(IV)溶于100ml四氯化碳, 回流6h。冷却后, 将反应液浓缩。剩余物用硅胶柱层析, 正己烷-乙酸乙酯(5: 1)洗脱, 得596mg化合物(V), 收率65. 2%, 熔点96. 0~97. 0℃。

350mg化合物(V)和70mg 10%钯-炭催化剂悬浮于100ml乙醇和1. 2ml1mol/L盐酸, 在室温和常压下, 氢化3h, 滤去催化剂, 并用少量乙醇洗。滤液和洗液合并后浓缩。剩余的固体溶于水, 并用乙醚洗。水层的Ph值用碳酸氢钠调至8后, 用乙酸乙酯提取。提取液用饱和盐水洗, 干燥, 浓缩, 得218mg无色粉末状的化合物(VI), 收率68. 4%。

102mg化合物(VI)和1ml三氟乙酸在室温下反应30min。浓缩后, 剩余物用乙醚浸渍, 得75. 5mg黄色粉末状的化合物(VII), 收率75. 5%。

约1mm直径的多孔陶瓷柱经γ-氨基丙基三乙氧硅烷处理后, 再用谷氨醛处理。粗酶(Kluyvera citrophila KY-7844的提取物)和上述处理过的多孔陶瓷反应, 得到固定酶。将9. 73g化合物(VII)溶于580ml磷酸缓冲液(Ph=6. 75)中, 加入51g苯甘氨酸甲酯。该混合液通过上述制备的含固定酶(185ml)的柱子, 柱子的内温保持在20℃, 循环3次, 约8. 5h。可得6. 15g氯碳头孢, 收率78. 2%, 熔点205~215℃(分解)。

方法2: 9. 20g化合物(VIII)溶于100ml氯仿, 加入2. 83ml苯硫酚和0. 5ml吡啶, 搅拌3h。浓缩, 剩余物用硅胶柱层析, 正己烷-乙酸乙酯(2: 1)洗脱。得9. 26g无色的化合物(IX)结晶, 收率77. 5%。

4. 78g化合物(IX)溶于100ml氯仿, 在0℃下加入2. 37g间氯过氧苯甲酸, 搅拌30min后, 再加入1 ml10%硫代硫酸钠溶液。分出有机层, 用饱和碳酸氢钠和饱和盐水洗, 干燥, 浓缩。剩余的白色固体溶于50ml二氯甲烷, 在冰浴冷却下加入1. 45ml硫酰氯, 在0℃下搅拌1h。用50ml二氯甲烷稀释后, 依次用10%柠檬酸溶液、碳酸氢钠溶液和饱和盐水洗, 干燥, 浓缩。得到的无色粉末溶于80ml甲苯, 回流2h后浓缩。剩余物用硅胶层析, 用正己烷-乙酸乙酯(1: 1)洗脱, 得3. 50g无色的化合物(X)的结晶, 收率87%, 熔点177. 6℃。

1. 7g化合物(X)和8ml三氟乙酸在0℃下搅拌1h。减压浓缩后, 得一棕色油。用乙醚浸渍后得1. 1g化合物(XI), 收率71. 8%。

10. 96g化合物(XI)溶于150ml水, 用1. 85倍的水合肼处理后, 用0. 2mol/L氢氧化钠调至Ph=7. 5~7. 7。在5℃下搅拌3h后, 升温至35℃, 用1mol/L盐酸酸化至Ph=0. 8, 放置4h。过滤除去沉淀, 滤液浓缩至93ml, 在室温放置过夜。过滤收集析出的沉淀, 干燥后得5. 54g化合物(VII)的粗品, 纯度83. 5%, 收率70. 6%。用层析提纯后可得无色的化合物(VII)的结晶。

化合物(VII)可按方法1得到氯碳头孢。

#### 相关化学品信息

[126848-06-4](#)   [126598-10-5](#)   [126210-25-1](#)   [120388-33-2](#)   [127607-85-6](#)   [1203-17-4](#)   [129462-42-6](#)   [T-丁基\(3S\)-3-氨基-4-苯基丁酸酯](#)  
[126622-44-4](#)   [125879-00-7](#)   [双\(环戊二烯\)钪](#)   [1212312-56-5](#)   [120200-78-4](#)   [4-\(甲基磺酰胺基\)苯胺. 氯化氢](#)   [121038-32-2](#)   473

生成时间2021/5/8 16:09:56