



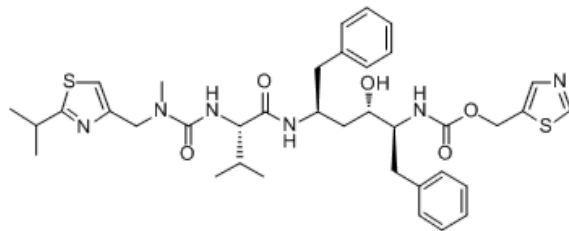
本PDF文件由 爱化学 IChemistry.cn 免费提供, 全部信息请点击[155213-67-5](#), 若要查询其它化学品请登录[CAS号查询网](#)

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:155213-67-5 基本信息

中文名:	利托那韦; N-[(2S,3S,5R)-3-羟基-5-[[[(2S)-3-甲基-2-[[[甲基-[(2-异丙基-1,3-噻唑-4-基)甲基]氨基甲酰]氨基]?
英文名:	Ritonavir
别名:	1,3-Thiazol-5-ylmethyl N-[(2S,3S,5R)-3-hydroxy-5-[[[(2S)-3-methyl-2-[[methyl-[(2-propan-2-yl-1,3-thiazol-4-yl)methyl]carbamoyl]amino]butanoyl]amino]-1,6-diphenyl-hexan-2-yl]carbamate

分子结构:



分子式:	C ₃₇ H ₄₈ N ₆ O ₅ S ₂
分子量:	720.94
CAS登录号:	155213-67-5

物理化学性质

性质描述:	瑞托那韦的性质: 本品的熔点: 120-122℃。
-------	------------------------------

安全信息

安全说明:	S26: 万一接触眼睛, 立即使用大量清水冲洗并送医诊治。 S37/39: 使用合适的手套和防护眼镜或者面罩。
危险类别码:	R36/38: 对眼睛和皮肤有刺激作用。

CAS#155213-67-5化学试剂供应商(点击生产商链接可查看价格)

大连美仑生物技术有限公司 专业从事155213-67-5及其他化工产品的生产销售 0411-82593631、82593920
孝感深远化工有限公司 (医药中间体生产商) 利托那韦专业生产商、供应商, 技术力量雄厚 0712-2580635 15527768836
将来试剂-打造最具性价比试剂品牌 长期供应N-[(2S,3S,5R)-3-羟基-5-[[[(2S)-3-甲基-2-[[[甲基-[(2-异丙基-1,3-噻唑-4-基)甲基]氨基甲酰]氨基]?
等化学试剂, 欢迎垂询报价 021-61552785

供应商信息已更新且供应商的链接失效, 请登录爱化学 [CAS No. 155213-67-5](#) 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:	瑞托那韦(155213-67-5)的用途: 本品为抗病毒药。拟肽的HIV-1蛋白酶抑制剂, 用于治疗艾滋病。
生产方法及其他:	1. 瑞托那韦(155213-67-5)的制备方法: 1. 制备方法一: 2-二苄基胺基-5-氨基-3-羟基-1,6-二苯基己烷溶于二氯甲烷, 加入4-异丙基-2,5-二羰基-1,3-噻唑烷和三乙胺的二氯甲烷溶液, 搅拌反应, 对5位氨基进行酰化, 往上述反应液中缓慢加入三乙胺, 再将得到的混合液加到三

光气的二氯甲烷溶液中，反应后缓慢加入2-异丙基-4-甲胺甲基-1，3-噻唑的二氯甲烷溶液，反应引入噻唑环。产物溶于乙酸，在钯催化下氢化。氢化产物溶于乙酸乙酯，加入碳酸氢钠水溶液，反应后分层。将分出的有机层加到碳酸(对硝基苯基)(5-噻唑基甲基)酯的乙酸乙酯溶液，反应得瑞托那韦。

2. 制备方法二：

1. 化合物(I)溶于二氯甲烷，在-15℃和氮气保护下加入化合物(II)和三乙胺的二氯甲烷溶液，搅拌2h，得到的混合液中含化合物(III)，直接用于下步反应。

往上述反应液中缓慢加入三乙胺，在-15~-13℃，将得到的混合液加到三光气的二氯甲烷溶液中，反应1.5h。缓慢加入化合物(IV)的二氯甲烷溶液，反应1h。加入水，分出有机层，用10%柠檬酸水溶液洗，浓缩。剩余物用硅胶提纯，得化合物(V)，以化合物(I)计的收率为38%。

2. 化合物(V)溶于乙酸，在钯催化下氢化。过滤，减压浓缩。剩余物溶于水，用氢氧化钠调至Ph=8。用二氯甲烷萃取，萃取液用水洗后，减压浓缩，得到化合物(VI)，直接用于下步反应。

将化合物(VII)溶于乙酸乙酯，加入碳酸氢钠水溶液，反应后分层。将分出的有机层加到化合物(VI)的乙酸乙酯溶液，在60℃反应12h。浓缩，加入氨水，搅拌1h。分出有机层，分别用10%碳酸钾和氯化钠水溶液洗。减压浓缩，剩余物用硅胶提纯，得瑞托那韦，以化合物(V)计的收率为27%。

2. 其它：

1、疏水参数计算参考值(XlogP)：6

2、氢键供体数量：4

3、氢键受体数量：7

4、可旋转化学键数量：18

5、互变异构体数量：16

6、拓扑分子极性表面积(TPSA)：146。

相关化学品信息

[15482-29-8](#)[15178-66-2](#)[150536-01-9](#)[158076-68-7](#)[15961-84-9](#)[异噻啉-N-氧化物](#)[15895-15-5](#)[151051-65-9](#)

[156779-05-4](#)[1569-82-0](#)[152381-97-0](#)[158001-21-9](#)[151530-42-6](#)[159359-56-5](#)[1570-09-8](#)445

生成时间2021/2/28 20:55:20