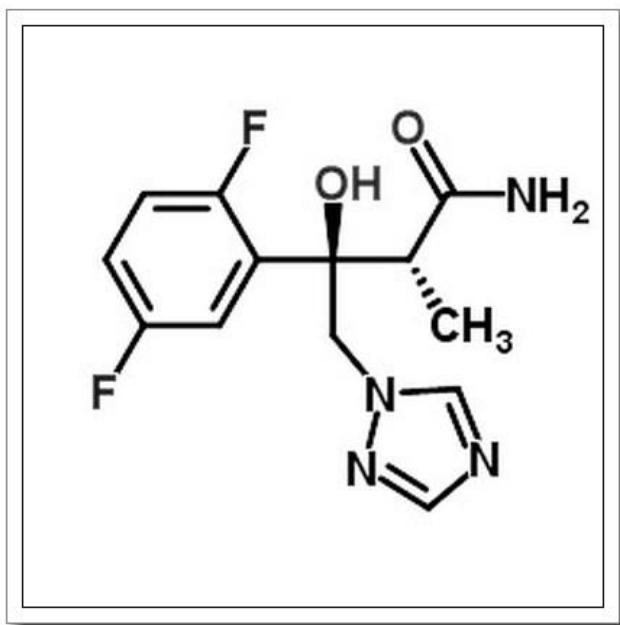


(2R,3R)-3-(2,5-二氟苯基)-3-羟基-2-甲基-4-(1H-1,2,4-三唑-1-基)丁酰胺

(2R, 3R)-3-(2, 5-Difluorophenyl)-3-hydroxy-2-methyl-4-(1H-1, 2, 4-triazol-1-yl)butanamide



产品基本信息

属性	值
化学名称	(2R, 3R)-3-(2, 5-Difluorophenyl)-3-hydroxy-2-methyl-4-(1H-1, 2, 4-triazol-1-yl)butanamide
中文名称	(2R, 3R)-3-(2, 5-二氟苯基)-3-羟基-2-甲基-4-(1H-1, 2, 4-三唑-1-基)丁酰胺
CAS 号	241479-75-4
分子式	C ₁₃ H ₁₄ F ₂ N ₄ O ₂
分子量	296. 273
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本产品为(2R, 3R)-3-(2, 5-二氟苯基)-3-羟基-2-甲基-4-(1H-1, 2, 4-三唑-1-基)丁酰胺, 化学式为 C₁₃H₁₄F₂N₄O₂, 分子量 296.273, CAS 号为 241479-75-4。该化合物是一种具有立体选择性的三唑类衍生物, 纯度高于 96%, 外观通常为白色至类白色结晶性粉末。其分子结构中的二氟苯基和三唑基团赋予其独特的化学性质, 包括良好的脂溶性和潜在的生物活性。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为三唑类小分子, 可能通过抑制特定酶活性或干扰细胞信号通路发挥作用。其羟基和酰胺基团为氢键供体和受体, 增强了与生物靶标的相互作用能力。二氟苯基的引入可提高代谢稳定性, 而三唑环则可能参与金属离子配位或 $\pi-\pi$ 堆积作用, 使其在药物化学和生物化学研究中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药研发领域, 特别是抗真菌药物和酶抑制剂的开发。其结构特征使其成为潜在的 CYP51 (羊毛甾醇 14 α -去甲基酶) 抑制剂候选物, 可用于研究真菌感染的治疗策略。此外, 在有机合成中可作为手性中间体, 用于构建更复杂的药物分子或生物活性化合物。

4. 储存条件与使用建议

建议在-20°C 下避光干燥保存, 长期储存需充惰性气体保护。使用时需在干燥环境中操作, 避免反复冻融。溶解性测试表明其易溶于 DMSO、甲醇等有机溶剂, 水溶性较低, 配制溶液时建议先以少量有机溶剂助溶后再用缓冲液稀释。实验操作需佩戴防护手套和护目镜。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 核磁共振 (NMR) 和质谱 (MS) 验证结构。安全数据表明其可能对眼睛和皮肤有刺激性, 操作时应避免直接接触。如不慎吸入或接

触，应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置需符合当地化学品管理法规。建议在通风橱中使用，并远离氧化剂和强酸强碱。