

(2R, 3S, 4S) -3-Fluoro- 4-(fluoromethyl)- 1- (phenylmethyl) -2-azetidincarboxylic acid methyl ester

产品图片未找到

产品基本信息

属性	值
化学名称	(2R, 3S, 4S) -3-Fluoro- 4-(fluoromethyl)- 1- (phenylmethyl) -2- azetidincarboxylic acid methyl ester
产品目录号	BGGCB-4595
CAS 号	
分子式	
分子量	
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为(2R, 3S, 4S)-3-氟-4-(氟甲基)-1-(苯甲基)-2-氮杂环丁烷甲酸甲酯，是一种高纯度有机氟化合物，目录号 BGGCB-4595。其分子结构包含氮杂环丁烷骨架、苯甲基取代基及氟代官能团，具有显著的空间位阻效应和电子特性。该化合物为无色至淡黄色液体或低熔点固体，易溶于常见有机溶剂如二甲基亚砜(DMSO)和甲醇，纯度经 HPLC 验证大于 96%。

2. 生物化学功能与重要性

作为含氟氮杂环衍生物，该化合物可通过抑制特定酶活性（如丝氨酸蛋白酶）参与生物调控。氟原子的强电负性可增强其与靶标蛋白的结合能力，而氮杂环丁烷结构赋予其构象刚性，在药物化学中常用于先导化合物优化。其在代谢稳定性与细胞膜穿透性方面表现优异，是开发抗炎、抗肿瘤药物的关键中间体。

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：一是作为蛋白酶抑制剂的核心骨架，用于设计抗病毒（如 HCV）或抗纤维化药物；二是在 PET 显影剂合成中作为氟-18 标记前体；三是在化学生物学研究中用于共价探针开发，靶向半胱氨酸残基。实验室级应用包括酶动力学研究、分子对接实验及结构-活性关系(SAR)分析。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于-20℃惰性气体（如氩气）环境中，避免光照与湿度。开封后需在干燥箱内分装使用。溶解时优先选用无水 DMSO（浓度≤10mM），工作液需现配现用。操作时应在通风橱中进行，佩戴耐溶剂手套（如丁腈材质）及护目镜。

5. 质量控制与安全信息

批次质检报告包含 HPLC 纯度、NMR 结构验证及 LC-MS 分子量确认。该化合物对呼吸道和皮肤有潜在刺激性，CAS 号未列于危险化学品目录但仍需按 GMP 标准处理。废弃处置应遵循有机氟化合物规范，建议通过专业化学品回收公司处理。急救措施

包括接触皮肤后立即用聚乙烯二醇-400 冲洗 15 分钟，眼部接触时使用生理盐水持续冲洗并就医。

（注：实际应用中需结合具体实验目的补充溶剂兼容性 & 细胞毒性测试数据）