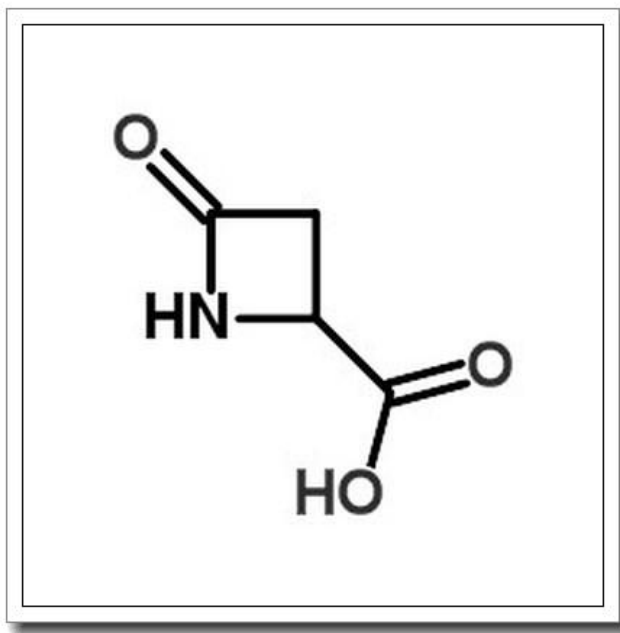


4-氧代-2-氮杂丁烷羧酸

4-Oxo-2-azetidinecarboxylic acid



产品基本信息

| 属性 | 值 |
|-------|---|
| 化学名称 | 4-Oxo-2-azetidinecarboxylic acid |
| 中文名称 | 4-氧代-2-氮杂丁烷羧酸 |
| CAS 号 | 98019-65-9 |
| 分子式 | C ₄ H ₅ N ₃ O ₃ |
| 分子量 | 115.087 |
| 纯度 | >96% |

产品说明

4-氧代-2-氮杂丁烷羧酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

4-氧代-2-氮杂丁烷羧酸 (4-Oxo-2-azetidincarboxylic acid) 是一种含氮杂环羧酸化合物，化学式为 $C_4H_5NO_3$ ，分子量为 115.087。其 CAS 号为 98019-65-9，常温下为白色至类白色结晶粉末，纯度标准高于 96%。该分子结构包含一个 β -内酰胺环（氮杂丁烷）和羧酸官能团，具有显著的极性特征，易溶于极性有机溶剂（如甲醇、DMSO），微溶于水。其稳定性受 pH 值影响，在酸性或中性条件下较为稳定，碱性环境中可能发生开环反应。

2. 生物化学功能与重要性

作为 β -内酰胺类化合物的衍生物，4-氧代-2-氮杂丁烷羧酸是合成抗生素和酶抑制剂的关键中间体。其结构中的四元环体系能够模拟肽键过渡态，因此常被用于设计丝氨酸蛋白酶抑制剂。此外，该分子在生物体内可能参与氮代谢途径，对研究微生物耐药机制和开发新型抗菌药物具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发领域，本产品主要用于以下方向：一是作为 β -内酰胺类抗生素（如青霉素、头孢菌素）的结构修饰前体；二是用于构建蛋白酶抑制剂库，针对肿瘤或炎症相关靶点进行筛选；三是在有机合成中作为手性砌块，参与不对称催化反应。在基础研究中，它可作为荧光标记探针或生物共轭试剂的羧基化修饰基团。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20°C 、干燥避光条件下长期储存，短期使用可置于 4°C 环境。开封后需充入惰性气体（如氮气）保护，避免吸湿降解。溶解时优先选用无水 DMSO，若需水溶液体系，建议现配现用并控制 pH 在 6-7 范围内。操作时应穿戴防护手套和护目镜，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。

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 USP 标准。MSDS 数据显示其急性毒

性较低 (LD50 > 2000 mg/kg, 大鼠口服), 但仍可能引起眼睛或呼吸道刺激。废弃物处理需遵守有机化学品处置规范, 不可直接排入下水道。运输分类为非危险品, 但建议使用防潮包装并避免与强氧化剂共存。

注: 具体实验方案请结合文献方法优化, 本说明数据基于实验室环境测试结果, 实际应用可能因工艺条件差异而调整。