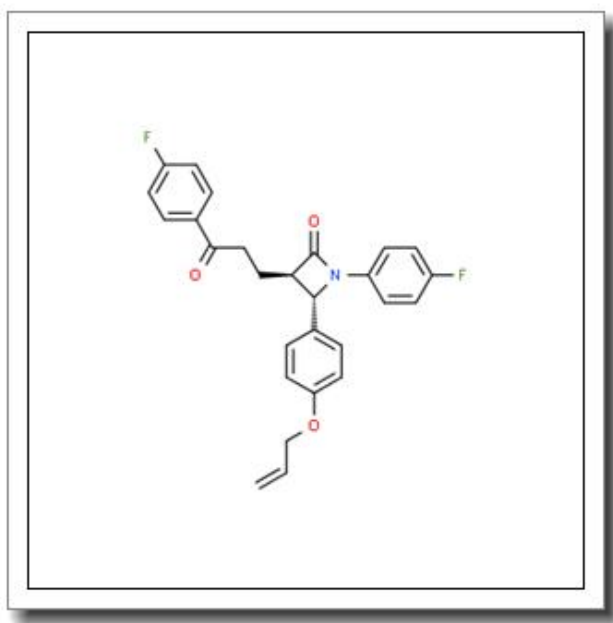


# (3R,4S)-1-(4-氟苯基)-3-[3-(4-氟苯基)-3-氧代丙基]-4-[4-(2-丙烯-1-基氧基)苯基]-2-氮杂环丁酮

*(3R, 4S)-1-(4-Fluorophenyl)-3-[3-(4-fluorophenyl)-3-oxopropyl]-4-[4-(2-propen-1-yloxy)phenyl]-2-azetidinone*



## 产品基本信息

| 属性    | 值                                                                                                           |
|-------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 化学名称  | (3R, 4S)-1-(4-Fluorophenyl)-3-[3-(4-fluorophenyl)-3-oxopropyl]-4-[4-(2-propen-1-yloxy)phenyl]-2-azetidinone |
| 中文名称  | (3R, 4S)-1-(4-氟苯基)-3-[3-(4-氟苯基)-3-氧代丙基]-4-[4-(2-丙烯-1-基氧基)苯基]-2-氮杂环丁酮                                        |
| CAS 号 | 1202579-25-6                                                                                                |
| 分子式   | C <sub>27</sub> H <sub>23</sub> F <sub>2</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>                                |
| 分子量   | 447.47                                                                                                      |

|    |             |
|----|-------------|
| 纯度 | $\geq 96\%$ |
|----|-------------|

## 产品说明

(3R, 4S) -1-(4-氟苯基)-3-[3-(4-氟苯基)-3-氧代丙基]-4-[4-(2-丙烯-1-基氧基)苯基]-2-氮杂环丁酮产品说明书

### 1. 产品概述与化学特性

本产品为高纯度  $\beta$ -内酰胺类化合物，化学名称如标题所示，CAS 号为 1202579-25-6，分子式 C<sub>27</sub>H<sub>23</sub>F<sub>2</sub>N<sub>3</sub>O<sub>3</sub>，分子量 447.47。其结构特征包含氟代苯基、丙烯氧基苯基及  $\beta$ -内酰胺环，赋予其独特的手性中心和立体选择性。常温下为白色至类白色结晶性粉末，易溶于有机溶剂如 DMSO、甲醇，纯度  $\geq 96\%$  (HPLC 检测)。

### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为  $\beta$ -内酰胺衍生物，可通过抑制青霉素结合蛋白 (PBPs) 干扰细菌细胞壁合成。其 4 位丙烯氧基苯基结构增强了膜穿透性，而双氟取代基可提高代谢稳定性，在抗菌药物研发中具有潜在应用价值。此外，其刚性氮杂环丁酮骨架可作为药效团用于设计蛋白酶抑制剂。

### 3. 主要应用领域与具体用途

目前主要用于以下领域：

- 医药研发：作为抗菌先导化合物或中间体，用于结构-活性关系 (SAR) 研究
- 有机合成：手性合成子，用于构建复杂杂环体系
- 生化工具：探索  $\beta$ -内酰胺酶耐药机制的探针分子

### 4. 储存条件与使用建议

储存于  $-20^{\circ}\text{C}$ 、避光、干燥的惰性气体环境中，有效期 24 个月。使用前需恢复至室温并氮气保护，建议工作浓度通过预实验确定 (常规研究用量 0.1-10 mM)。溶解时优先选用无水 DMSO，避免与强氧化剂、酸碱接触。

### 5. 质量控制与安全信息

经 HPLC、NMR 及质谱验证结构，残留溶剂符合 ICH 标准。安全数据：

- GHS 分类：皮肤致敏性 (Category 2)、急性毒性 (口服 Category 4)

- 防护措施: 操作时穿戴防护手套/眼镜, 在通风橱中进行
- 应急处理: 接触皮肤立即用肥皂水冲洗, 吸入时转移至新鲜空气处

本产品仅限科研使用, 不适用于临床或食品领域。如需进一步技术参数, 请索取 COA 报告。