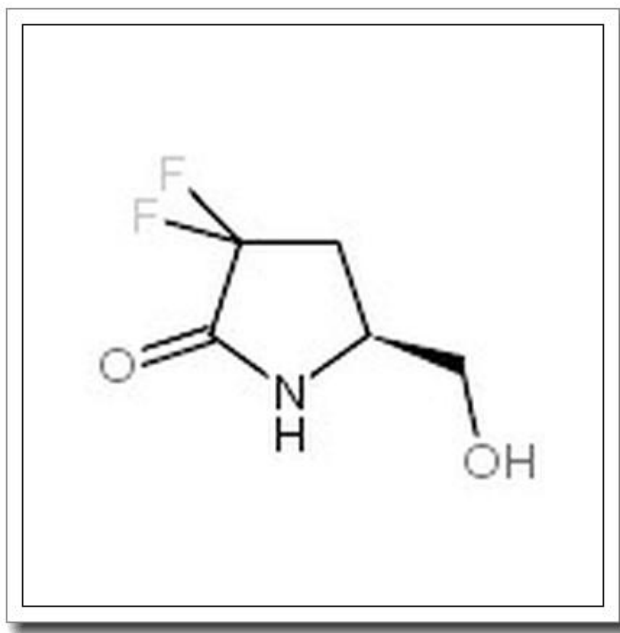


3,3-二氟-5-(羟甲基)-(5S)-2-吡咯烷酮

(5S)-3,3-difluoro-5-(hydroxymethyl)pyrrolidin-2-one



产品基本信息

属性	值
化学名称	(5S)-3,3-difluoro-5-(hydroxymethyl)pyrrolidin-2-one
中文名称	3,3-二氟-5-(羟甲基)-(5S)-2-吡咯烷酮
CAS 号	255903-84-5
分子式	C ₅ H ₇ F ₂ N ₂ O ₂
分子量	151.111
纯度	>96%

产品说明

3, 3-二氟-5-(羟甲基)-(5S)-2-吡咯烷酮产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为(5S)-3, 3-difluoro-5-(hydroxymethyl)pyrrolidin-2-one, 是一种含氟吡咯烷酮衍生物, CAS 号为 255903-84-5。其分子式为 C₅H₇F₂N₂O₂, 分子量 151.111, 纯度>96%。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 具有显著的手性中心(5位 S 构型)和亲水性羟甲基官能团, 同时 3 位双氟取代赋予其独特的电子效应和代谢稳定性。

2. 生物化学功能与重要性

作为含氟杂环化合物, 其结构特征使其在药物化学中具有重要价值: 氟原子的引入可增强脂溶性、改善膜穿透性, 同时吡咯烷酮骨架是多种生物活性分子的核心结构。羟甲基的存在为后续衍生化(如酯化、醚化)提供了关键位点, 使其成为合成抗生素、神经保护剂及酶抑制剂的重要中间体。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要应用于以下领域:

- 医药研发: 用于构建含氟药物分子库, 特别是中枢神经系统(CNS)靶向药物和抗感染药物的先导化合物优化
- 材料科学: 作为含氟高分子单体的前体, 用于制备具有特殊表面性能的功能材料
- 生物探针开发: 通过标记或修饰, 用于研究酶活性位点或分子识别机制

4. 储存条件与使用建议

建议在-20° C、惰性气体(如氩气)保护下避光保存, 开封后需充氮密封。使用前需恢复至室温并避免吸湿。溶解性测试表明其在 DMSO、甲醇中溶解度良好(>50 mg/mL), 水溶液中需超声辅助溶解。实验操作建议在通风橱中进行, 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 (UV 210 nm) 检测纯度>96%, 残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。MS 和

NMR 谱图数据可随货提供。安全数据：急性毒性（LD50 大鼠口服）>2000 mg/kg，但可能引起眼睛和皮肤刺激。操作时需佩戴防护眼镜、丁腈手套，若接触立即用大量清水冲洗 15 分钟并就医。废弃物处理应遵守当地危险化学品管理条例。

（注：本说明基于现有研究数据编制，具体应用需结合实验条件进一步验证。）