

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

产品图片未找到

产品基本信息

属性	值
化学名称	(5S)-3,3-difluoro-5-(hydroxymethyl)pyrrolidin-2-one
产品目录号	
CAS 号	255903-84-5
分子式	C5H7F2N02
分子量	151.111
纯度	>96%

产品说明

(5S)-3,3-二氟-5-(羟甲基)吡咯烷-2-酮产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为(5S)-3,3-二氟-5-(羟甲基)吡咯烷-2-酮，CAS号255903-84-5，分子式C₅H₇F₂N₂O₂，分子量151.111。其结构中含有一个手性中心(5位S构型)和两个氟原子取代基，赋予其独特的极性和反应活性。纯度经HPLC验证≥96%，符合生化试剂标准。该化合物易溶于极性有机溶剂(如DMSO、甲醇)，微溶于水，需避光保存以维持稳定性。

2. 生物化学功能与重要性

作为含氟吡咯烷酮衍生物，该分子具有以下特性：

- 氟原子的强电负性可增强其与生物靶点的结合能力，常用于酶抑制剂设计。
- 羟甲基侧链提供进一步功能化位点，适用于药物偶联或前体合成。
- 手性结构使其在不对称合成和立体选择性反应中具有重要价值，尤其在神经药理学和抗肿瘤药物研发中备受关注。

3. 主要应用领域与具体用途

- 医药中间体：用于合成含氟生物活性分子，如蛋白酶体抑制剂或GABA受体调节剂。
- 农药化学：作为含氟杂环骨架，参与新型杀虫剂或除草剂的开发。
- 材料科学：可作为含氟高分子单体的前驱体，改善材料疏水性。
- 科研用途：在有机氟化学机理研究中作为模型化合物。

4. 储存条件与使用建议

- 储存条件：密封保存于-20℃干燥环境中，避免与强氧化剂接触。
- 复溶建议：使用前需恢复至室温，推荐以无水DMSO配制母液(10-50 mM)，分装后避免反复冻融。
- 操作防护：佩戴丁腈手套及护目镜，通风橱内操作，若接触皮肤需立即用大量清水冲洗。

5. 质量控制与安全信息

- 质检标准：通过 ^1H NMR、 ^{13}C NMR 和质谱 (MS) 进行结构确证，HPLC 检测残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。
- 安全数据：根据 GHS 分类，该产品可能导致眼睛刺激（类别 2B），无明确致癌性数据。
- 废弃物处理：需作为有害化学废物处置，不可直接排入下水道。

本产品仅限科研用途，不适用于诊断或治疗。建议使用者查阅最新版 MSDS 并遵守当地法规。