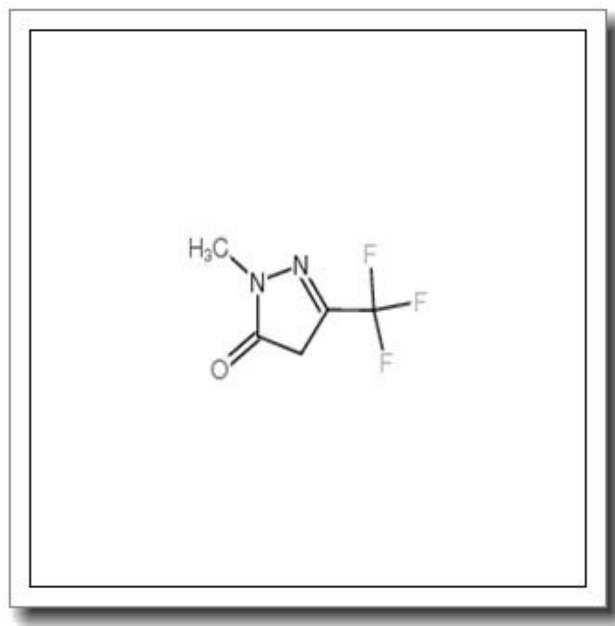


1-甲基-3-三氟甲基-2-吡咯烷酮

2-methyl-5-(trifluoromethyl)-4H-pyrazol-3-one



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-methyl-5-(trifluoromethyl)-4H-pyrazol-3-one
中文名称	1-甲基-3-三氟甲基-2-吡咯烷酮
CAS 号	1481-02-3
分子式	C ₅ H ₅ F ₃ N ₂ O
分子量	166.101
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为 2-methyl-5-(trifluoromethyl)-4H-pyrazol-3-one (中文名: 1-甲基-3-三氟甲基-2-吡咯烷酮), CAS 号 1481-02-3, 分子式 $C_5H_5F_3N_2O$, 分子量 166.101。外观通常为白色至类白色结晶或粉末, 纯度 $\geq 96\%$ 。该化合物含吡唑酮骨架和三氟甲基官能团, 具有高极性、低挥发性及良好的有机溶剂溶解性 (如乙醇、DMSO)。其化学稳定性在常温干燥条件下良好, 但需避免强酸强碱环境。

2. 生物化学功能与重要性

作为含氟杂环化合物, 其结构中的三氟甲基赋予分子独特的电子效应和脂溶性, 在药物化学中常用于增强代谢稳定性及生物膜穿透性。吡唑酮核心结构可参与氢键形成和金属配位, 使其成为酶抑制剂设计或金属蛋白酶研究的潜在工具分子。在生物活性筛选和先导化合物优化中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要应用于医药研发和有机合成领域。在药物开发中, 常用作抗炎、抗肿瘤或抗菌类化合物的中间体。具体用途包括: 1) 构建含三氟甲基的杂环药物骨架; 2) 作为蛋白激酶抑制剂的修饰基团; 3) 用于荧光标记探针的合成。此外, 在农用化学品研发中也有应用潜力。

4. 储存条件与使用建议

建议密封储存于 -20°C 至 4°C 干燥环境中, 避免光照和湿度。开封后需充惰性气体保护以延长稳定性。使用时应佩戴防护手套、护目镜, 在通风橱中操作。溶解推荐使用无水 DMSO 或乙醇, 配制溶液需现配现用, 长期存放可能导致降解。

5. 质量控制与安全信息

本品通过 HPLC 检测纯度, 批号关联 COA (质量分析证书)。安全数据表明其 LD_{50} (大鼠口服) $> 500 \text{ mg/kg}$, 但可能对眼睛和皮肤有刺激性。安全术语包含 S22 (勿吸入粉尘)、S24/25 (避免接触皮肤和眼睛)。废弃处理需符合危险化学品处置规范, 建议通过专业机构回收。

(注: 实际使用前请务必查阅最新版 MSDS 并执行风险评估。)