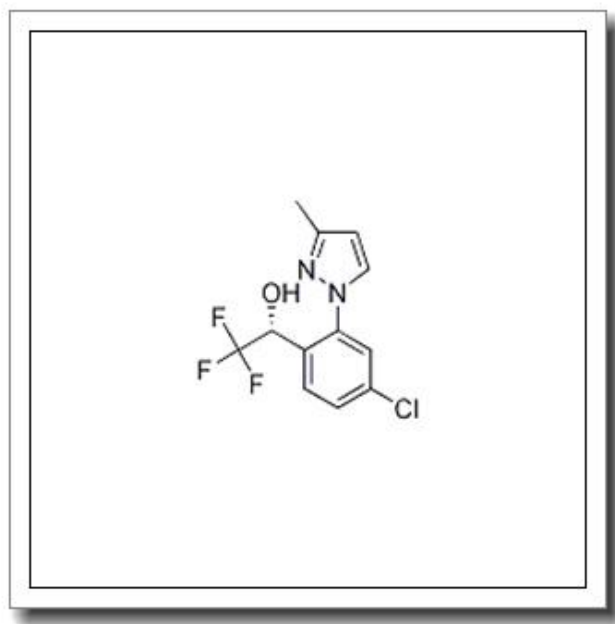


TELOTRISTAT ETIPRATE 中间体

(R)-1-(4-Chloro-2-(3-Methyl-1H-pyrazol-1-yl)phenyl)-2,2,2-trifluoroethanol



产品基本信息

属性	值
化学名称	(R)-1-(4-Chloro-2-(3-Methyl-1H-pyrazol-1-yl)phenyl)-2,2,2-trifluoroethanol
中文名称	TELOTRISTAT ETIPRATE 中间体
CAS 号	1033805-26-3
分子式	C ₁₂ H ₁₀ ClF ₃ N ₂ O
分子量	290.6688096
纯度	≥ 96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

(R)-1-(4-氯-2-(3-甲基-1H-吡唑-1-基)苯基)-2,2,2-三氟乙醇 (CAS 号: 1033805-26-3) 是一种重要的有机中间体, 分子式为 $C_{12}H_{10}ClF_3N_2O$, 分子量为 290.6688096。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 纯度 $\geq 96\%$, 具有手性中心, 属于光学活性物质。其结构中包含氯代苯基、三氟乙醇基团以及甲基吡唑杂环, 赋予其独特的化学稳定性和反应活性。该产品需避光保存, 易溶于有机溶剂如二甲基亚砜 (DMSO) 和甲醇, 但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

作为 TELOTRISTAT ETIPRATE 的关键中间体, 该化合物在药物合成中扮演重要角色。其结构中的三氟乙醇基团可增强代谢稳定性, 而吡唑环则可能参与靶标蛋白的相互作用。该手性中间体的立体构型对最终药物的生物活性具有显著影响, 因此在合成过程中需严格控制光学纯度以确保药效。

3. 主要应用领域与具体用途

主要用于抗肿瘤药物 TELOTRISTAT ETIPRATE 的合成工艺, 作为核心手性构建模块。在医药研发领域, 可用于:

- 新型芳基吡唑类化合物的结构修饰
- 含氟手性药物的先导化合物开发
- 酶抑制剂类药物的中间体合成

4. 储存条件与使用建议

储存于 -20°C 至 4°C 的密闭容器中, 充惰性气体保护。开封后建议分装使用, 避免反复冻融。操作时需在通风橱中进行, 佩戴防护手套、护目镜及实验服。溶解建议使用无水级有机溶剂, 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

通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 手性纯度 $\geq 99\%$ (ee 值)。残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。

安全警示: 可能引起眼睛和皮肤刺激, 吸入或食入有害。CAS 号 1033805-26-3 已列入化学品安全技术说明书 (MSDS), 应急处理需参照 GHS 分类:

- H315 造成皮肤刺激
- H319 造成严重眼刺激
- H335 可能引起呼吸道刺激

废弃处置应遵守当地法规, 不可直接排入环境。