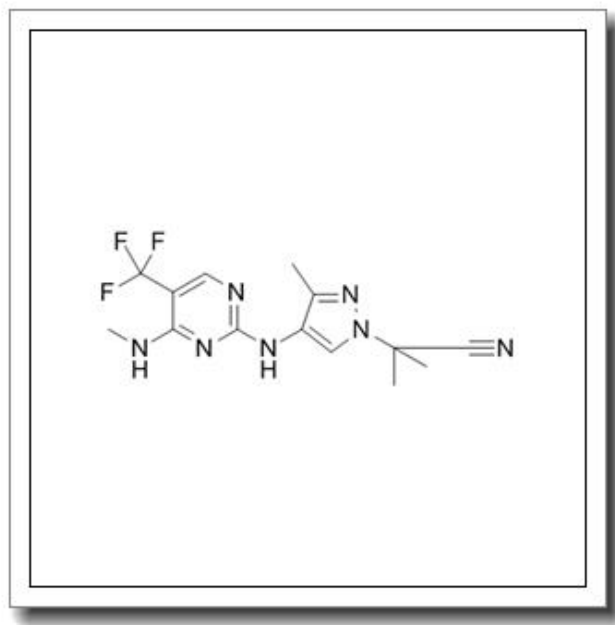


alpha,alpha,3-三甲基-4-[[4-(甲基氨基)-5-(三氟甲基)-2-嘧啶基]氨基]-1H-吡唑-1-乙腈

1H- Pyrazole- 1- acetonitrile, α , α , 3- trimethyl- 4- [[4- (methylamino) - 5- (trifluoromethyl) - 2- pyrimidinyl] amino] -



产品基本信息

属性	值
化学名称	1H- Pyrazole- 1- acetonitrile, α , α , 3- trimethyl- 4- [[4- (methylamino) - 5- (trifluoromethyl) - 2- pyrimidinyl] amino] -
中文名称	alpha, alpha, 3-三甲基-4-[[4-(甲基氨基)-5-(三氟甲基)-2-嘧啶基]氨基]-1H-吡唑-1-乙腈
CAS 号	1374828-69-9

分子式	C ₁₄ H ₁₆ F ₃ N ₇
分子量	339.319
纯度	≥ 96%

产品说明

1H-吡唑-1-乙腈衍生物产品说明书

产品概述与化学特性

本产品为高纯度有机化合物，化学名称为 $\alpha, \alpha, 3$ -三甲基-4-[[4-(甲基氨基)-5-(三氟甲基)-2-嘧啶基]氨基]-1H-吡唑-1-乙腈 (CAS 号: 1374828-69-9)，分子式 $C_{14}H_{16}F_3N_7$ ，分子量 339.319。其结构包含吡唑环、嘧啶氨基及三氟甲基等活性基团，赋予其独特的化学性质。产品为白色至类白色结晶粉末，纯度 $\geq 96\%$ ，需避光保存于干燥环境。

生物化学功能与重要性

该化合物作为嘧啶类衍生物，可通过干扰核苷酸代谢或抑制特定酶活性参与生物调控。三氟甲基的强电负性增强了其与靶标蛋白的结合能力，而吡唑乙腈结构则提供了分子柔性，使其在药物化学中具有重要价值。其氨基嘧啶片段可能参与氢键形成，适用于设计激酶抑制剂或抗代谢类药物。

主要应用领域与具体用途

1. 医药研发：作为先导化合物用于抗肿瘤、抗病毒或抗炎药物的结构优化，尤其针对依赖嘧啶代谢的疾病模型。
2. 农药开发：三氟甲基特性使其可能成为农用化学品（如杀菌剂）的活性组分。
3. 生化探针：修饰后可作为标记物研究酶作用机制或细胞信号通路。

储存条件与使用建议

储存于 -20°C 、惰性气体保护的密闭容器中，有效期 24 个月。使用前需恢复至室温并干燥处理，避免反复冻融。建议在通风橱中操作，使用干燥 DMSO 或 DMF 溶解，配制后溶液需现配现用。

质量控制与安全信息

通过 HPLC、NMR 及质谱进行批次质检，符合 IUPAC 标准。该化合物可能对眼睛和呼吸道有刺激性，操作时需佩戴护目镜、防尘口罩及丁腈手套。若不慎接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应作为有害化学物质处理，遵守当地环保法规。

(注: 本说明基于现有研究数据, 具体应用需进一步实验验证。)