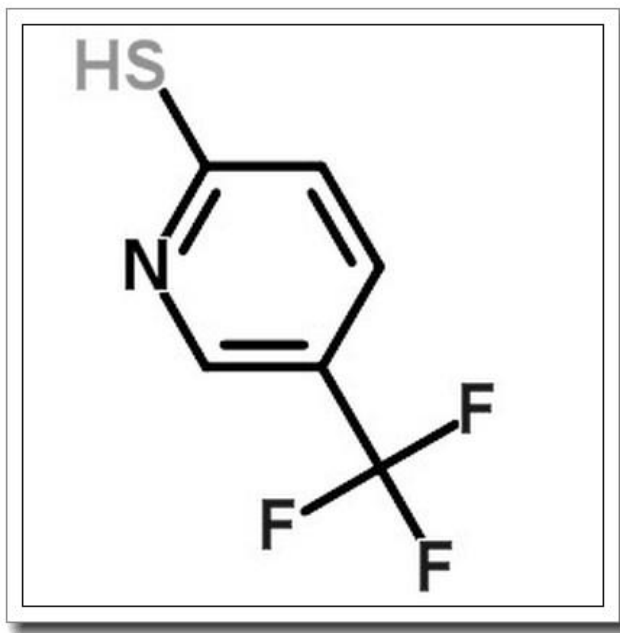


## 2-巯基-5-(三氟甲基)吡啶

*2-Mercapto-5-(trifluoromethyl)pyridine*



### 产品基本信息

属性	值
化学名称	2-Mercapto-5-(trifluoromethyl)pyridine
中文名称	2-巯基-5-(三氟甲基)吡啶
CAS 号	76041-72-0
分子式	C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> F <sub>3</sub> NS
分子量	179.163
纯度	>96%

## 产品说明

### 2-巯基-5-(三氟甲基)吡啶产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

2-巯基-5-(三氟甲基)吡啶 (CAS 号: 76041-72-0) 是一种含硫杂环化合物, 分子式为  $C_6H_4F_3NS$ , 分子量 179.163。该化合物以吡啶环为母核, 在 2 位取代巯基 (-SH), 5 位连接三氟甲基 (-CF<sub>3</sub>), 兼具芳香性和高反应活性。其纯度 >96%, 常温下为白色至淡黄色结晶或粉末, 可溶于常见有机溶剂 (如乙醇、二氯甲烷), 微溶于水。三氟甲基的强吸电子效应与巯基的亲核特性使其成为重要的合成中间体。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为含硫吡啶衍生物, 该化合物可通过巯基参与金属配位、氧化还原反应及亲核取代反应, 三氟甲基则显著增强其脂溶性和代谢稳定性。在生物化学领域, 其结构特性被用于模拟天然含硫配体, 或作为酶抑制剂的设计模块。此外, 三氟甲基的引入可优化化合物的药代动力学性质, 在药物研发中具有特殊价值。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

3.1 医药化学: 用于构建抗病毒、抗肿瘤药物的核心骨架, 尤其是靶向激酶或蛋白酶的小分子抑制剂。

3.2 材料科学: 作为配体参与金属有机框架 (MOFs) 或催化剂的合成, 改善材料的选择性吸附能力。

3.3 农药开发: 衍生为高效杀虫剂或杀菌剂的活性成分, 利用三氟甲基增强生物活性。

3.4 科研试剂: 在有机合成中用于 C-S 键偶联反应或作为荧光探针的修饰基团。

#### 4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中, 避光、防潮, 建议温度 2-8°C 冷藏保存。长期存放需充惰性气体 (如氮气) 保护。使用时应在通风橱中操作, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试推荐优先选用极性有机溶剂, 反应体系中需注意巯基的氧化敏感性。

## 5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 >96%，MS 及 NMR 确证结构。安全数据表明，其具刺激性，可能引起皮肤、眼睛黏膜损伤。操作时需佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩。若发生泄漏，应立即用惰性吸附材料处理，避免使用氧化性清洁剂。废弃物处置需符合危险化学品管理规范。

（注：本说明基于现有研究数据，具体应用需结合实验条件进一步验证。）