

2-Mercapto-5-(trifluoromethyl)pyridine

产品图片未找到

产品基本信息

属性	值
化学名称	2-Mercapto-5-(trifluoromethyl)pyridine
产品目录号	
CAS 号	76041-72-0
分子式	C ₆ H ₄ F ₃ 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。该物质为白色至淡黄色结晶粉末, 纯度 >96%, 具有吡啶环的碱性特征与巯基的高反应活性, 同时三氟甲基的强吸电子效应赋予其独特的化学稳定性。其熔点和沸点数据需通过实验测定, 易溶于有机溶剂如甲醇、乙醚, 微溶于水。

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 (-SH) 参与亲核取代、金属配位等反应, 三氟甲基的引入增强了其脂溶性和代谢稳定性。在生物体系中, 此类结构常作为酶抑制剂或信号分子修饰剂, 尤其适用于靶向含金属离子的活性位点 (如锌指蛋白)。其高电子密度特性使其成为药物化学中构建杂环骨架的关键中间体。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发领域, 本品用于合成抗炎、抗肿瘤药物的核心结构, 例如作为 JAK 激酶抑制剂的修饰基团。材料科学中可用于制备含氟液晶材料或光电分子器件。农业化学方面, 其衍生物可作为高效杀虫剂的活性成分。实验室中常用作金属螯合剂或催化反应配体。

4. 储存条件与使用建议

储存于 -20°C 惰性气体 (如氩气) 保护的密闭容器中, 避免光照与潮湿环境。开封后建议分装使用以减少氧化风险。操作时需在通风橱中进行, 佩戴防化手套及护目镜。溶解建议使用干燥 DMF 或 THF, 现配现用。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC 确保纯度 >96%, 批次间保留时间偏差 <2%。GC-MS 用于检测有机溶剂残留。该化合物对呼吸道和皮肤有刺激性 (GHS 分类: H315/H319/H335), 接触后需立即用大量清水冲洗。废弃物应作为有害化学品处理, 遵守当地法规。

(注: 实际应用中请以具体实验数据及安全技术说明书 (MSDS) 为准。)