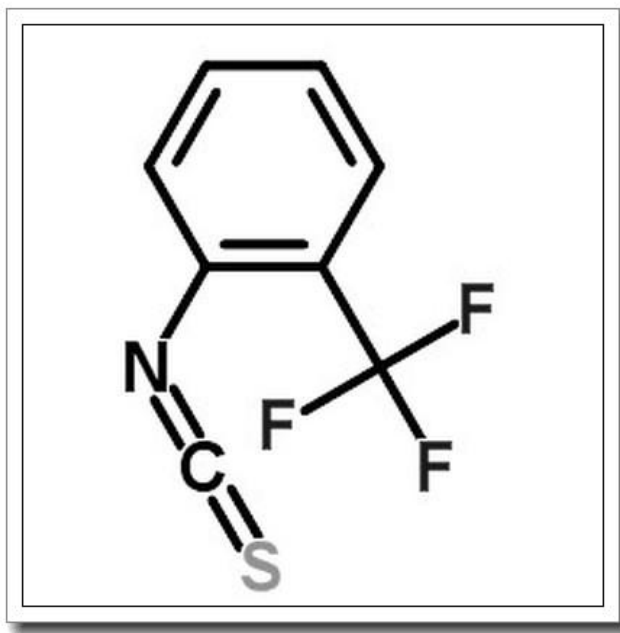


2-(三氟甲基)苯基异硫代氰酸酯

2-(trifluoromethyl)phenyl isothiocyanate



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-(trifluoromethyl)phenyl isothiocyanate
中文名称	2-(三氟甲基)苯基异硫代氰酸酯
CAS 号	1743-86-8
分子式	C ₈ H ₄ F ₃ NS
分子量	203.184
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

2-(三氟甲基)苯基异硫代氰酸酯 (2-(trifluoromethyl)phenyl isothiocyanate) 是一种含氟有机硫化合物, CAS 号为 1743-86-8, 分子式为 $C_8H_4F_3NS$, 分子量为 203.184。该化合物为无色至淡黄色液体, 具有刺激性气味, 纯度通常高于 96%。其结构中包含异硫代氰酸酯基团 ($-N=C=S$) 和三氟甲基 ($-CF_3$), 赋予其较高的反应活性和疏水性, 适用于多种有机合成与生物化学应用。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为异硫代氰酸酯类衍生物, 能够与氨基、巯基等亲核基团发生特异性反应, 形成硫脲或硫代氨基甲酸酯结构。这一特性使其在蛋白质修饰、酶抑制研究和药物开发中具有重要价值。三氟甲基的引入进一步增强了其脂溶性和代谢稳定性, 使其在生物活性分子设计中备受关注。

3. 主要应用领域与具体用途

2-(三氟甲基)苯基异硫代氰酸酯广泛应用于医药、农药和材料科学领域。在药物研发中, 它可作为中间体用于合成抗肿瘤、抗炎或抗菌化合物; 在农药领域, 用于构建含氟高效杀虫剂或除草剂。此外, 该化合物还可用于荧光标记、高分子材料改性以及作为金属离子螯合剂的前体。

4. 储存条件与使用建议

建议将本品密封保存于阴凉、干燥、通风良好的环境中, 避免光照和潮湿, 储存温度以 $2-8^{\circ}C$ 为宜。使用时需在通风橱中操作, 避免直接接触皮肤或吸入蒸气。因其对水分敏感, 开封后应尽快使用并充入惰性气体保护。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测, 纯度 $\geq 96\%$, 并提供相关质检报告 (COA)。其具有刺激性, 可能引起皮肤、眼睛和呼吸道损伤, 操作时需佩戴防护手套、护目镜和防毒面具。若不慎接触, 应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物需按危险化学品规范处置, 避免环境污染。