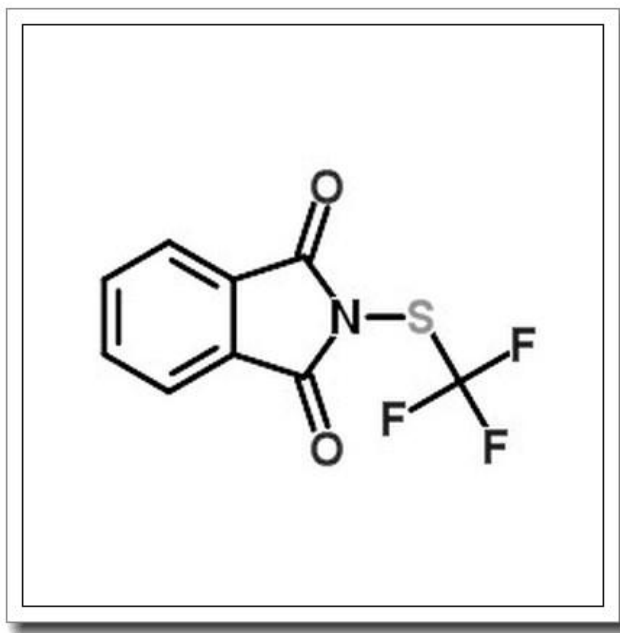


2-(三氟甲硫基)异吲哚-1,3-二酮

2-[(Trifluoromethyl)sulfanyl]-1H-isoindole-1,3(2H)-dione



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-[(Trifluoromethyl)sulfanyl]-1H-isoindole-1,3(2H)-dione
中文名称	2-(三氟甲硫基)异吲哚-1,3-二酮
CAS 号	719-98-2
分子式	C ₉ H ₄ F ₃ N ₂ O ₂ S
分子量	247.194
纯度	>96%

产品说明

2-(三氟甲硫基)异吲哚-1,3-二酮产品说明

1. 产品概述与化学特性

2-(三氟甲硫基)异吲哚-1,3-二酮 (化学名称: 2-[(Trifluoromethyl)sulfanyl]-1H-isoindole-1,3(2H)-dione) 是一种含三氟甲硫基的杂环化合物, CAS 号为 719-98-2, 分子式为 C₉H₄F₃N₂O₂S, 分子量为 247.194。该化合物以白色至类白色结晶或粉末形式存在, 纯度高于 96%, 具有较高的化学稳定性。其结构中的三氟甲硫基 (-SCF₃) 赋予其独特的电子效应和疏水性, 使其在有机合成和药物化学中具有重要价值。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为三氟甲硫基化试剂, 能够高效引入三氟甲硫基团至目标分子中。三氟甲硫基 (-SCF₃) 是药物设计中常见的药效团, 可显著改善化合物的代谢稳定性、脂溶性和生物活性。其在生物活性分子中的引入, 常被用于优化药物候选化合物的药代动力学性质, 因此在创新药物研发中具有广泛的应用潜力。

3. 主要应用领域与具体用途

2-(三氟甲硫基)异吲哚-1,3-二酮主要用于医药中间体和有机合成领域。具体用途包括:

- 作为三氟甲硫基化试剂, 参与构建含-SCF₃ 的杂环或芳香族化合物。
- 用于合成具有抗菌、抗炎或抗肿瘤活性的药物分子。
- 在材料科学中, 用于制备含氟功能材料, 提升材料的耐候性和化学惰性。

4. 储存条件与使用建议

本品需密封保存于干燥、阴凉的环境中, 避免光照和潮湿。推荐储存温度为 2-8°C, 长期保存建议充入惰性气体 (如氮气) 以延长稳定性。使用时需在通风橱中操作, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明, 该化合物易溶于二甲基亚砜 (DMSO) 和部分有机溶剂, 使用时需选择合适的溶剂体系。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测，纯度 $\geq 96\%$ ，并提供详细的质量分析报告（COA）。安全信息如下：

- 可能对眼睛、皮肤和呼吸道产生刺激性，操作时需佩戴防护手套、护目镜和口罩。
- 若不慎接触，立即用大量清水冲洗，并就医处理。
- 废弃物需按照危险化学品规范处置，避免环境污染。

本产品仅供科研用途，不适用于人体或临床治疗。购买后请仔细阅读技术资料，并在专业人员指导下使用。