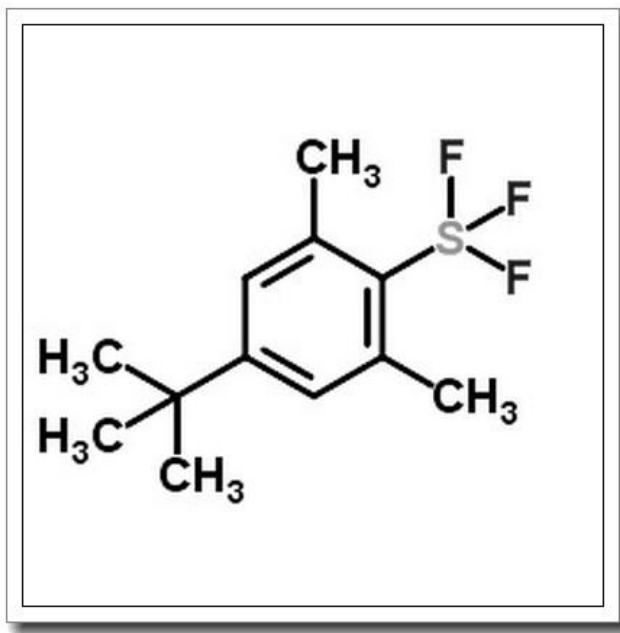


# 4-叔丁基-2,6-二甲基苯基三氟化硫

*(4-tert-butyl-2,6-dimethylphenyl)-trifluoro-λ4-sulfane*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	(4-tert-butyl-2,6-dimethylphenyl)-trifluoro-λ4-sulfane
中文名称	4-叔丁基-2,6-二甲基苯基三氟化硫
CAS 号	947725-04-4
分子式	C <sub>12</sub> H <sub>17</sub> F <sub>3</sub> S
分子量	250.324
纯度	>96%

## 产品说明

### 4-叔丁基-2,6-二甲基苯基三氟化硫产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为(4-tert-butyl-2,6-dimethylphenyl)-trifluoro-λ 4-sulfane, 中文名称为 4-叔丁基-2,6-二甲基苯基三氟化硫, CAS 号为 947725-04-4。其分子式为 C<sub>12</sub>H<sub>17</sub>F<sub>3</sub>S, 分子量为 250.324, 纯度大于 96%。该化合物是一种含硫有机氟化物, 具有稳定的三氟化硫基团和空间位阻较大的叔丁基结构, 使其在化学反应中表现出独特的活性和选择性。

#### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物在有机合成中作为重要的三氟甲基化试剂或硫转移试剂, 能够高效引入三氟甲基或含硫官能团。其叔丁基和甲基的立体位阻效应可调节反应位点选择性, 在药物分子修饰和材料科学中具有特殊价值。三氟甲基的强电负性使其在调节化合物脂溶性、代谢稳定性和生物活性方面发挥关键作用。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药中间体合成、农药活性成分开发及功能材料研究领域。具体用途包括: 作为抗肿瘤药物分子中三氟甲基的引入试剂; 用于合成具有抗菌活性的含硫杂环化合物; 在液晶材料中作为极性调节基团的前体。实验室研究中常用于构建 C-SF<sub>3</sub> 键的模型反应。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议在-20℃以下避光保存, 置于干燥惰性气体(如氩气)环境中。开封后需充氮气保护并密封。使用时应佩戴防化手套、护目镜及防毒面具, 操作环境需配备通风设备。溶解性测试表明易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂, 建议在水条件下进行反应配置。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度 >96%, GC-MS 确认分子量及结构。危险类别为刺激性化学品, UN 编号未列管但仍需按危险品运输。接触皮肤后应立即用大量清水冲洗 15

分钟，若吸入蒸汽需转移至空气新鲜处。废弃物处理需符合当地有机氟化物处置法规，禁止直接排入下水系统。

（注：本说明基于当前研究数据，具体应用需结合实验条件优化。安全数据详见随货 MSDS 文件。）