

N-三氟甲硫基琥珀酰亚胺

1-[(trifluoromethyl)thio]-2,5-Pyrrolidinedione



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-[(trifluoromethyl)thio]-2,5-Pyrrolidinedione
中文名称	N-三氟甲硫基琥珀酰亚胺
CAS 号	183267-04-1
分子式	C ₅ H ₄ F ₃ N ₂ O ₂ S
分子量	199.151
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

N-三氟甲硫基琥珀酰亚胺 (1-[(trifluoromethyl)thio]-2,5-Pyrrolidinedione) 是一种含硫杂环化合物, CAS 号为 183267-04-1, 分子式为 $C_5H_4F_3N_2O_2S$, 分子量为 199.151。该化合物以琥珀酰亚胺为母核, 三氟甲硫基 (-SCF₃) 作为关键官能团, 赋予其独特的化学性质。其纯度通常高于 96%, 外观为白色至类白色结晶或粉末, 具有良好的有机溶剂溶解性 (如乙腈、二氯甲烷等), 但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

三氟甲硫基 (-SCF₃) 是药物化学和材料科学中备受关注的官能团, 具有高亲脂性、代谢稳定性和强电子效应。N-三氟甲硫基琥珀酰亚胺作为三氟甲硫基化试剂, 能够高效地将 -SCF₃ 基团引入目标分子, 广泛应用于复杂分子的结构修饰。其在生物活性分子 (如药物先导化合物) 的合成中尤为重要, 可显著改善化合物的膜渗透性和代谢稳定性。

3. 主要应用领域与具体用途

该试剂主要用于有机合成和药物研发领域, 具体用途包括:

- 作为三氟甲硫基化试剂, 用于芳烃、烯烃、杂环化合物的官能团化;
- 参与过渡金属催化反应 (如钯催化交叉偶联), 构建含 -SCF₃ 的医药中间体;
- 用于合成具有抗菌、抗肿瘤活性的含氟药物分子;
- 在材料科学中用于改性高分子材料的表面性能。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C 以下避光干燥储存, 长期保存需充惰性气体 (如氮气) 保护。使用时需在干燥环境下操作, 避免接触水分或强氧化剂。溶解推荐使用无水有机溶剂, 反应体系应严格除氧。因 -SCF₃ 基团可能释放腐蚀性气体 (如 HF), 实验需在通风橱中进行, 并佩戴防护装备。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 杂质主要为未反应原料及水解副产物。安全信息

需注意:

- 对眼睛、皮肤和呼吸道有刺激性，操作时需穿戴护目镜、手套和防护服；
- 遇水可能缓慢分解，避免与酸、碱或氧化剂共同存放；
- 废弃物需按危险化学品处理规范处置。

建议用户查阅材料安全数据表（MSDS）获取详细毒理学数据和应急处理措施。