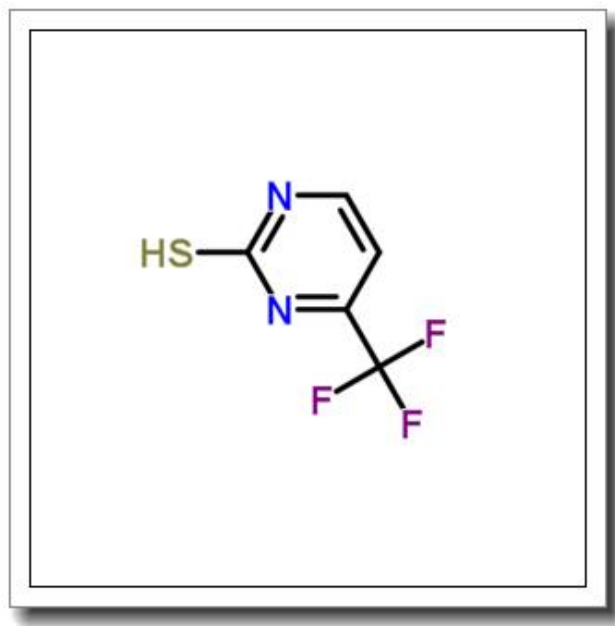


4-(三氟甲基)-2-巯基嘧啶

2-Mercapto-4-trifluoromethylpyrimidine



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-Mercapto-4-trifluoromethylpyrimidine
中文名称	4-(三氟甲基)-2-巯基嘧啶
CAS 号	136547-17-6
分子式	C ₅ H ₃ F ₃ N ₂ S
分子量	180.151
纯度	≥96%

产品说明

2-巯基-4-三氟甲基嘧啶产品说明书

1. 产品概述与化学特性

2-巯基-4-三氟甲基嘧啶 (2-Mercapto-4-trifluoromethylpyrimidine) 是一种含氟嘧啶衍生物，化学式为 $C_5H_3F_3N_2S$ ，分子量 180.151，CAS 号 136547-17-6。该化合物为白色至类白色结晶粉末，纯度 $\geq 96\%$ ，具有显著的疏水性和电子效应，三氟甲基的强吸电子特性使其在亲核取代反应中表现出高反应活性。巯基 (-SH) 的存在为其提供了配位能力和氧化敏感性，需在惰性气氛下保存。

2. 生物化学功能与重要性

作为嘧啶类骨架的修饰物，该化合物可通过巯基与金属离子或蛋白质的巯基结合位点特异性相互作用，在酶抑制研究中具有潜在价值。三氟甲基的引入增强了其代谢稳定性和膜渗透性，使其成为药物化学中常见的药效团，尤其在抗病毒和抗肿瘤先导化合物设计中备受关注。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发领域，本品常用于构建含三氟甲基的嘧啶类小分子库，用于激酶抑制剂或核苷类似物的合成。在材料科学中，可作为有机合成中间体制备荧光标记物或配体。此外，在农业化学中用于开发新型杀虫剂或杀菌剂的活性成分。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 $-20^{\circ}C$ 惰性气体 (如氩气) 环境中，避免光照和湿度。开封后需在干燥箱内操作，防止氧化。溶解时优先选用无水 DMF 或 DMSO，若需水溶液体系，建议添加 1-5mM DTT 作为还原剂以维持巯基稳定性。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，残留溶剂符合 ICH 标准。操作时需佩戴防毒面具及丁腈手套，在通风橱中进行。其急性毒性数据 (LD50 大鼠口服) 为 320mg/kg，属于有害物质，避免吸入或皮肤直接接触。废弃物处置应遵循危险化学品处理规范。

(注: 本说明基于现有研究数据编制, 具体应用需结合实验条件进一步优化。)