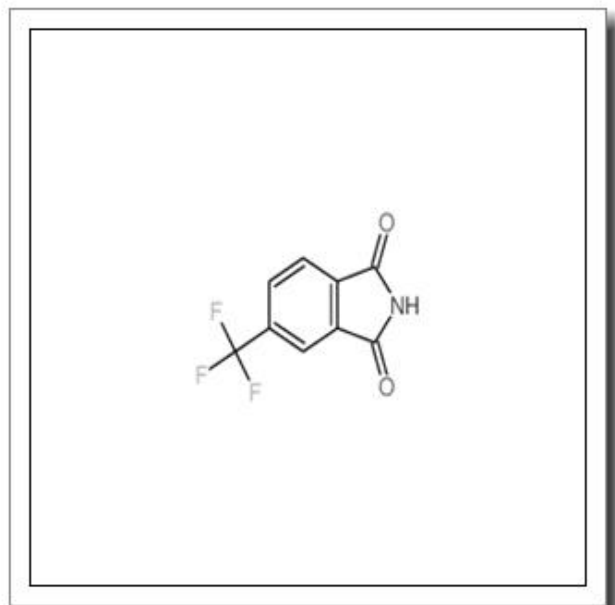


5-(trifluoromethyl)isoindole-1,3-dione

5-(trifluoromethyl)isoindole-1,3-dione



产品基本信息

属性	值
化学名称	5-(trifluoromethyl)isoindole-1,3-dione
中文名称	5-(trifluoromethyl)isoindole-1,3-dione
CAS 号	1997-41-7
分子式	C ₉ H ₄ F ₃ N ₂ O ₂
分子量	215.129
纯度	≥ 96%

产品说明

产品说明

1. 产品概述与化学特性

5-(三氟甲基)异吲哚啉-1,3-二酮 (5-(trifluoromethyl)isoindole-1,3-dione) 是一种含氟杂环化合物, CAS 号为 1997-41-7, 分子式为 C₉H₄F₃N₂O₂, 分子量为 215.129。该化合物以白色至类白色结晶或粉末形式存在, 纯度不低于 96%。其结构中的三氟甲基 (-CF₃) 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

作为一种含氟杂环骨架, 5-(三氟甲基)异吲哚啉-1,3-二酮在生物活性分子设计中具有广泛应用。三氟甲基的引入可显著改善化合物的代谢稳定性、脂溶性和生物利用度, 因此在药物研发中常用于先导化合物的结构修饰。此外, 其异吲哚啉二酮结构可能参与氢键相互作用, 影响蛋白质结合或酶抑制活性。

3. 主要应用领域与具体用途

该化合物主要用于医药中间体和有机合成领域。具体用途包括:

- 作为含氟杂环砌块, 用于构建抗肿瘤、抗炎或中枢神经系统药物的核心骨架。
- 在材料科学中, 可作为功能化单体参与高性能聚合物的合成。
- 在农药化学中, 用于开发具有高效生物活性的含氟农药。

4. 储存条件与使用建议

建议将本品置于干燥、阴凉的环境中, 避免光照和潮湿。储存温度应控制在 2-8° C, 长期保存需充惰性气体保护。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 N,N-二甲基甲酰胺 (DMF), 微溶于醇类溶剂。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测, 纯度 ≥96%。使用时需佩戴防护手套、护目镜和实验服, 避

免与强氧化剂接触。若意外接触眼睛或皮肤，应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应按照当地法规处理，不可随意排放。安全数据表（SDS）可应要求提供。

本品仅供科研用途，不适用于食品、药品或家庭用途。