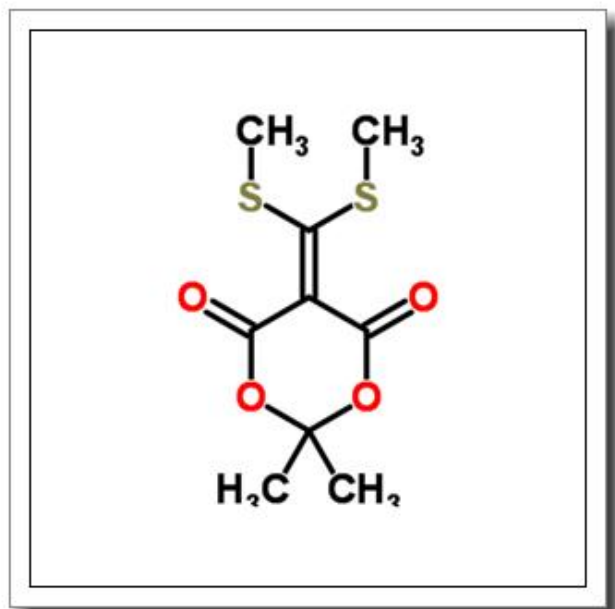


5-[双(甲基硫代)亚甲基]-2,2-二甲基-1,3-二噁烷-4,6-二酮

5-[bis(methylsulfanyl)methylidene]-2,2-dimethyl-1,3-dioxane-4,6-dione



产品基本信息

属性	值
化学名称	5-[bis(methylsulfanyl)methylidene]-2,2-dimethyl-1,3-dioxane-4,6-dione
中文名称	5-[双(甲基硫代)亚甲基]-2,2-二甲基-1,3-二噁烷-4,6-二酮
CAS 号	100981-05-3
分子式	C ₉ H ₁₂ O ₄ S ₂
分子量	248.319
纯度	≥96%

产品说明

5-[双(甲基硫代)亚甲基]-2,2-二甲基-1,3-二噁烷-4,6-二酮产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为高纯度有机硫化合物，化学名称 5-[bis(methylsulfanyl)methylidene]-2,2-dimethyl-1,3-dioxane-4,6-dione, CAS 号 100981-05-3。分子式 C₉H₁₂O₄S₂，分子量 248.319，外观通常为白色至淡黄色结晶粉末。其结构中含二噁烷二酮骨架与硫醚官能团，赋予其独特的反应活性。纯度 ≥96% (HPLC)，需避光保存以防分解。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为多功能合成砌块，其硫醚基团可参与亲核取代反应，而二酮结构易与氨基或巯基发生缩合。在生物化学研究中，常用于修饰蛋白质或多肽的活性位点，也可作为酶抑制剂设计的核心骨架。其甲基硫代特性在药物开发中具有调控脂溶性和靶向性的潜力。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于三大领域：一是医药中间体合成，特别是抗肿瘤和抗菌药物研发中作为关键前体；二是材料科学中用于制备含硫高分子单体；三是生化试剂领域，作为蛋白质交联剂或小分子探针的合成原料。具体实验中可用于构建杂环化合物或作为 Michael 加成受体。

4. 储存条件与使用建议

建议长期储存于-20℃、惰性气体保护下，短期使用可存放于 2-8℃干燥器。开封后需充氮密封，避免接触氧化剂和强酸强碱。实验操作应在通风橱中进行，佩戴防尘口罩和丁腈手套。溶解性测试表明其易溶于二甲基亚砜 (DMSO)，推荐先用 DMSO 配制成母液后再稀释。

5. 质量控制与安全信息

本批次产品经 HPLC 检测纯度 ≥96%，核磁共振 (1H NMR) 与质谱 (MS) 验证结构。潜在危害包括皮肤刺激性 (GHS 分类 Category 2) 和眼睛损伤 (Category 1)，应

急处理时需用大量清水冲洗接触部位 15 分钟。废弃物应作为有害化学废料处置，遵守当地环保法规。

注：具体实验方案请参阅最新文献，产品性能可能因应用体系而异。