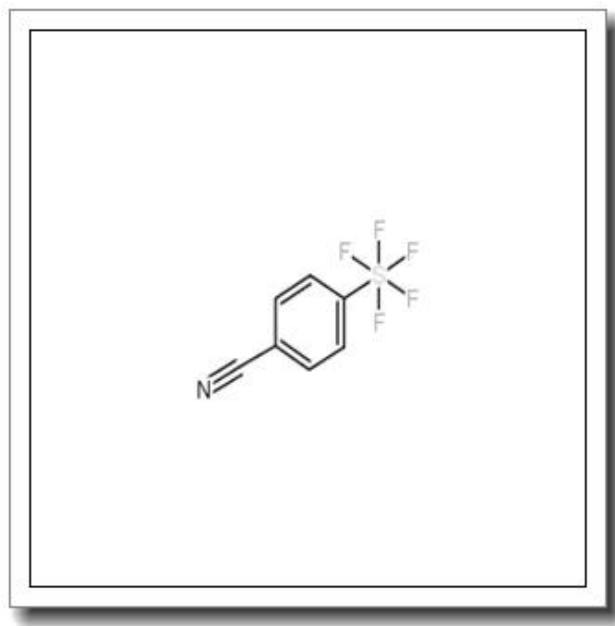


五氟化(4-氰苯基)硫

4-(pentafluoro-λ 6-sulfanyl)benzotrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-(pentafluoro-λ 6-sulfanyl)benzotrile
中文名称	五氟化(4-氰苯基)硫
CAS 号	401892-85-1
分子式	C7H4F5NS
分子量	229.17
纯度	≥96%

产品说明

4-(五氟化硫烷基)苯甲腈产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 4-(pentafluoro- λ 6-sulfanyl)benzotrile, 中文名为五氟化(4-氰苯基)硫, CAS 号为 401892-85-1。其分子式为 $C_7H_4F_5NS$, 分子量为 229.17, 纯度 $\geq 96\%$ 。该化合物为含氟有机硫衍生物, 结构中的五氟化硫烷基 (SF_5) 与苯甲腈基团结合, 赋予其高稳定性、强吸电子特性及独特的空间位阻效应。常温下呈白色至类白色结晶或粉末, 需避光保存。

2. 生物化学功能与重要性

五氟化硫烷基的引入显著增强了分子的亲脂性和代谢稳定性, 使其成为药物化学中重要的结构修饰基团。氰基的存在进一步提供了与生物靶标相互作用的活性位点。该化合物在抑制酶活性、调控信号通路等方面具有潜在价值, 尤其适用于开发抗肿瘤、抗炎及中枢神经系统药物。

3. 主要应用领域与具体用途

作为关键中间体, 本产品广泛应用于医药研发、农药合成及材料科学领域。在医药中, 用于构建含 SF_5 的先导化合物, 优化药物分子的生物利用度; 在农药领域, 可作为高效杀虫剂或杀菌剂的活性片段; 在材料科学中, 用于合成具有特殊光电性能的高分子材料。

4. 储存条件与使用建议

储存于 $-20^{\circ}C$ 至 $4^{\circ}C$ 的密闭容器中, 避免潮湿、光照及强氧化剂。使用时需在惰性气体 (如氮气) 保护下操作, 佩戴防护手套、护目镜及防毒面具。溶解性测试建议优先选用二甲基亚砜 (DMSO) 或乙腈等极性有机溶剂。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 验证纯度 $\geq 96\%$, 批次间稳定性严格把控。安全数据表明, 其具有刺激性, 可能引起皮肤、眼睛及呼吸道损伤。操作时应遵守 GHS 标准, 标识代码为 H302-H315-H319-H335。废弃物需按危险化学品规范处置, 避免环境污染。

注：以上信息基于现有研究数据，具体应用需进一步实验验证。建议用户在专业指导下使用本产品。