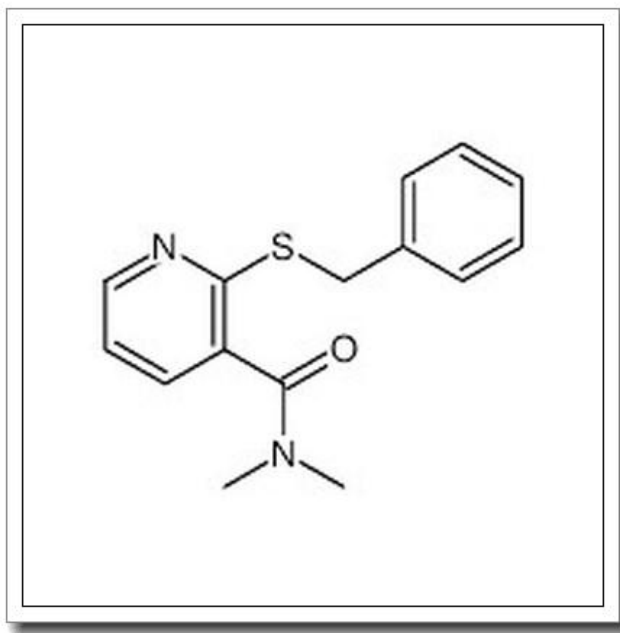


# 2-(苄基硫代)-N,N-二甲基烟酰胺

*2-(Benzylthio)-N,N-dimethylnicotinamide*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	2-(Benzylthio)-N,N-dimethylnicotinamide
中文名称	2-(苄基硫代)-N,N-二甲基烟酰胺
CAS 号	112006-57-2
分子式	C <sub>15</sub> H <sub>16</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub> S
分子量	272.365
纯度	>96%

## 产品说明

### 1. 产品概述与化学特性

2-(苄基硫代)-N,N-二甲基烟酰胺 (化学名称: 2-(Benzylthio)-N,N-dimethylnicotinamide, CAS 号: 112006-57-2) 是一种有机硫化合物, 分子式为  $C_{15}H_{16}N_2OS$ , 分子量为 272.365。该化合物以烟酰胺为母核, 通过苄基硫代基团修饰, 具有较高的化学稳定性和特异性。其纯度标准为 >96%, 外观通常为白色至淡黄色结晶或粉末, 可溶于常见有机溶剂如甲醇、乙醇和二甲基亚砜 (DMSO), 但在水中溶解度较低。

### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物在生物化学研究中具有潜在的应用价值。其结构中的烟酰胺基团与辅酶  $NAD^+/NADH$  类似, 可能参与氧化还原反应或作为酶抑制剂。苄基硫代基团的引入增强了其脂溶性和细胞膜穿透能力, 使其在药物化学和分子探针开发中备受关注。此外, 该分子可能作为中间体用于合成更复杂的生物活性分子。

### 3. 主要应用领域与具体用途

2-(苄基硫代)-N,N-二甲基烟酰胺主要用于医药研发和生化研究领域。具体用途包括: 作为小分子抑制剂或激动剂筛选的候选化合物; 用于构建杂环化合物库的中间体; 在药物化学中用于结构-活性关系 (SAR) 研究。此外, 它还可能用于开发新型抗炎或抗肿瘤药物的先导化合物。

### 4. 储存条件与使用建议

建议将本品置于  $-20^{\circ}C$  干燥避光环境中保存, 长期储存需充惰性气体保护。使用时需在干燥惰性气氛下操作, 避免接触强氧化剂或强酸强碱。溶解时建议使用无水有机溶剂, 并现配现用。实验人员应佩戴防护手套、护目镜和实验服, 在通风橱中操作。

### 5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测确认纯度 >96%, 并提供核磁共振 (NMR) 和质谱 (MS) 数据支持。安全信息显示, 该化合物可能对眼睛、皮肤和呼吸系统有刺激性, 操作时应避

免吸入或直接接触。如不慎接触，应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物需按危险化学品规范处置。具体安全数据请参考提供的材料安全数据表（MSDS）。