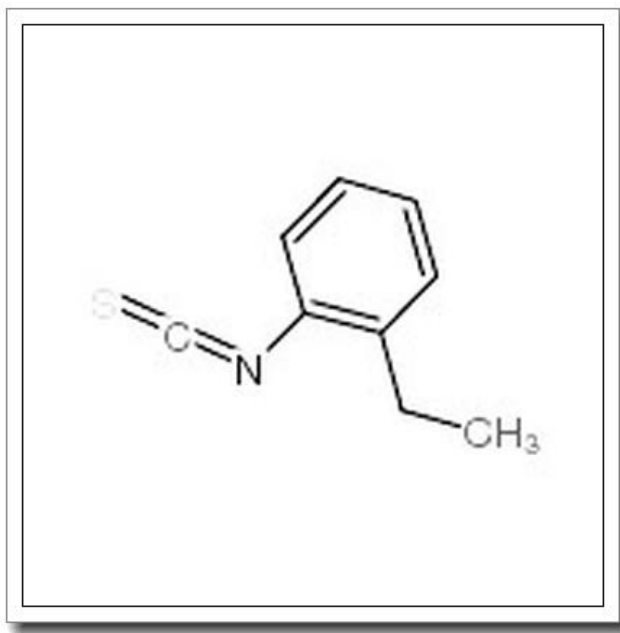


2-乙基异硫氰酸苯酯

1-ethyl-2-isothiocyanatobenzene



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-ethyl-2-isothiocyanatobenzene
中文名称	2-乙基异硫氰酸苯酯
CAS 号	19241-19-1
分子式	C ₉ H ₉ NS
分子量	163. 239
纯度	>96%

产品说明

2-乙基异硫氰酸苯酯产品说明

1. 产品概述与化学特性

2-乙基异硫氰酸苯酯 (1-ethyl-2-isothiocyanatobenzene) 是一种有机硫化合物, CAS 号为 19241-19-1, 分子式为 C₉H₉NS, 分子量为 163.239。本品为无色至淡黄色液体, 纯度>96%, 具有典型的异硫氰酸酯类刺激性气味。其化学结构中包含高反应活性的异硫氰酸酯基团 (-N=C=S), 可与氨基、巯基等亲核基团发生特异性反应, 这一特性使其在生物偶联和修饰领域具有重要价值。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为异硫氰酸酯衍生物, 能够与蛋白质、多肽等生物分子中的游离氨基 (如赖氨酸侧链) 形成稳定的硫脲键, 常用于生物标记、蛋白质交联和固定化实验。此外, 其在天然产物合成和药物中间体制备中也有广泛应用, 是构建含硫杂环化合物的关键原料。

3. 主要应用领域与具体用途

- 蛋白质化学研究: 用于蛋白质或多肽的共价修饰, 实现荧光标记或亲和纯化探针的制备。
- 药物开发: 作为合成抗肿瘤或抗菌药物的中间体, 参与构建活性分子骨架。
- 材料科学: 在功能化聚合物合成中作为交联剂, 改善材料性能。
- 农业化学: 部分衍生物可作为植物生长调节剂或杀虫剂的前体。

4. 储存条件与使用建议

本品需避光密封保存于 2-8°C 干燥环境中, 开封后建议充氮保护以延长稳定性。使用时应佩戴防护手套、护目镜及防毒面具, 在通风橱中操作。避免与强氧化剂、强酸强碱接触, 防止分解产生有毒气体 (如异氰酸酯或硫化氢)。溶解推荐使用无水 DMF 或 DMSO 等极性非质子溶剂。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC 和 NMR 确保纯度>96%, 批次间一致性控制在±1%以内。安全数据表明,

该物质对眼睛、皮肤和呼吸道有强烈刺激性（GHS 分类：皮肤腐蚀/刺激类别 2，严重眼损伤/刺激类别 1），操作后需彻底清洗接触部位。如发生泄漏，需用惰性吸附材料处理并通风稀释。运输时按危险化学品管理，UN 编号需参照当地法规。

（全文共计 436 字）