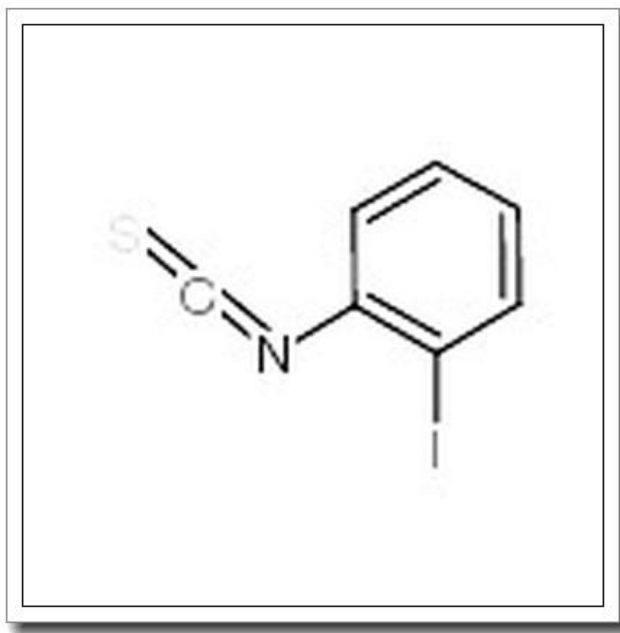


2-碘基异硫氰酸苯酯

1-iodo-2-isothiocyanatobenzene



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-iodo-2-isothiocyanatobenzene
中文名称	2-碘基异硫氰酸苯酯
CAS 号	98041-44-2
分子式	C ₇ H ₄ INS
分子量	261.083
纯度	>96%

产品说明

1-碘-2-异硫氰酸苯酯产品说明书

产品概述与化学特性

1-碘-2-异硫氰酸苯酯 (1-iodo-2-isothiocyanatobenzene) 是一种有机合成中间体, 化学式为 C_7H_4INS , 分子量 261.083, CAS 号为 98041-44-2。该化合物为浅黄色至棕色结晶或粉末, 纯度通常高于 96%。其结构中的异硫氰酸酯基 ($-N=C=S$) 和碘原子赋予其高反应活性, 使其成为重要的功能化试剂。该化合物易溶于有机溶剂如二氯甲烷、乙腈和 DMF, 但在水中稳定性较差, 需避免潮湿环境。

生物化学功能与重要性

该化合物的异硫氰酸酯基可与氨基 ($-NH_2$) 发生特异性反应, 形成稳定的硫脲衍生物, 这一特性使其在蛋白质标记、生物共轭和分子探针合成中具有广泛应用。碘原子的存在进一步扩展了其功能, 使其可通过偶联反应 (如 Suzuki 反应) 引入芳环结构。在生物化学研究中, 它是修饰肽链、固定化生物分子或构建荧光标记物的关键试剂。

主要应用领域与具体用途

1. 蛋白质化学: 用于蛋白质 N 端或赖氨酸残基的共价修饰, 辅助结构分析与功能研究。
2. 药物开发: 作为合成含碘或硫脲结构药物的中间体, 例如抗甲状腺药物或抗菌剂。
3. 材料科学: 参与制备功能化高分子材料, 如导电聚合物或生物传感器界面。
4. 分析化学: 衍生化试剂, 用于高效液相色谱 (HPLC) 或质谱检测中的分子标记。

储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 下避光保存, 置于干燥惰性气体 (如氩气) 环境中。开封后需密封防潮, 避免反复冻融。使用时应在通风橱中操作, 佩戴防护手套和护目镜。溶解推荐使用无水 DMF 或乙腈, 反应体系需严格除水以提高效率。

质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 验证纯度，批次检测报告可随货提供。其异硫氰酸酯基可能释放刺激性气体，接触皮肤或吸入会导致过敏或呼吸道损伤。应急处理：皮肤接触立即用肥皂水冲洗，吸入时转移至通风处。废弃物需按有害化学品规范处置，避免强氧化剂接触。

（注：实际使用前请查阅最新材料安全数据表 MSDS 并遵循实验室安全规程。）