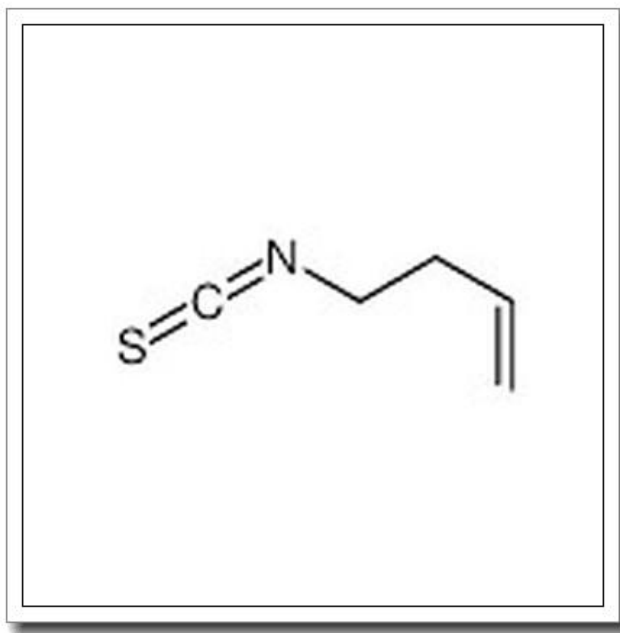


3-丁烯基异硫氰酸酯

4-isothiocyanatobut-1-ene



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-isothiocyanatobut-1-ene
中文名称	3-丁烯基异硫氰酸酯
CAS 号	3386-97-8
分子式	C ₅ H ₇ NS
分子量	113.181
纯度	>96%

产品说明

3-丁烯基异硫氰酸酯产品说明

1. 产品概述与化学特性

3-丁烯基异硫氰酸酯 (4-isothiocyanatobut-1-ene) 是一种有机硫化合物, CAS 号为 3386-97-8, 分子式为 C_5H_7NS , 分子量为 113.181。本品为无色至淡黄色液体, 纯度高于 96%, 具有典型的异硫氰酸酯类刺激性气味。其结构中包含高反应活性的异硫氰酸酯基团 ($-N=C=S$) 和烯烃基团, 使其易于参与亲核加成反应和聚合反应。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物是植物次生代谢产物中的重要成员, 尤其在十字花科植物 (如芥菜、甘蓝) 中作为天然防御物质存在。其生物活性主要体现在与蛋白质的氨基、巯基等官能团发生特异性结合, 从而影响酶活性和细胞功能。在生物研究中, 常作为蛋白质修饰试剂或小分子探针, 用于研究蛋白质结构和功能。

3. 主要应用领域与具体用途

3-丁烯基异硫氰酸酯广泛应用于生物化学和医药研究领域。在药物开发中, 可用于构建含硫靶向分子或作为中间体合成抗肿瘤化合物。在农业科学中, 其衍生物可作为环保型杀虫剂或植物生长调节剂。此外, 在食品科学中用于风味物质分析, 因其与天然辣味成分的结构相似性。

4. 储存条件与使用建议

本品需避光保存于 $2-8^{\circ}C$ 的密闭容器中, 长期储存建议充氮保护以延缓氧化。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、强碱或胺类物质接触, 以防剧烈反应。开封后建议尽快使用, 剩余试剂需严格密封。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测确认纯度 $>96\%$, 并符合企业内控标准。安全信息提示: 该物质对皮肤、眼睛和呼吸道有强烈刺激性, 可能引起过敏反应。若不慎接触, 需立即

用大量清水冲洗并就医。运输分类为危险化学品（UN 编号 2810），需按腐蚀性液体规范操作。废弃物处理应遵守当地环保法规，不可直接排入下水道。