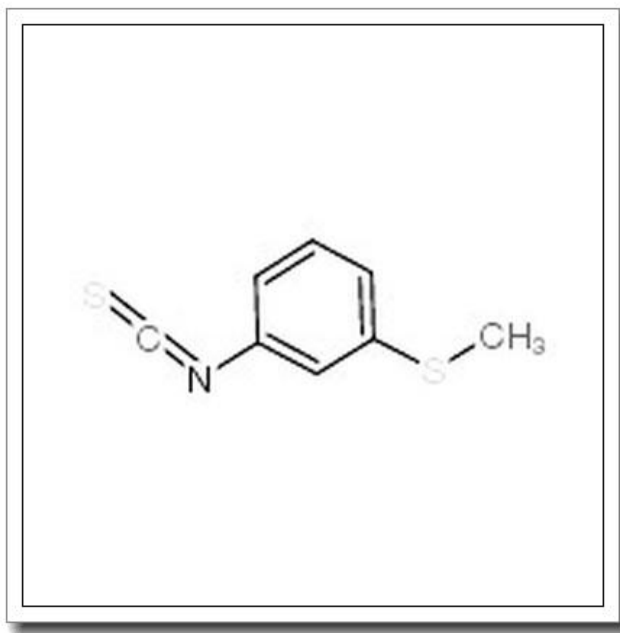


# 3-(甲基硫代)异硫氰酸苯酯

*3-(methylthio)phenyl isothiocyanate*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	3-(methylthio)phenyl isothiocyanate
中文名称	3-(甲基硫代)异硫氰酸苯酯
CAS 号	51333-80-3
分子式	C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> NS <sub>2</sub>
分子量	181.278
纯度	>96%

## 产品说明

### 3-(甲基硫代)异硫氰酸苯酯产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

3-(甲基硫代)异硫氰酸苯酯 (英文名称: 3-(methylthio)phenyl isothiocyanate) 是一种含硫有机化合物, 化学式为  $C_8H_7NS_2$ , 分子量 181.278, CAS 号为 51333-80-3。本品为无色至淡黄色液体或低熔点固体, 纯度高于 96%, 具有特征性刺激性气味。其分子结构中的异硫氰酸酯基 ( $-N=C=S$ ) 和甲基硫醚基 ( $-S-CH_3$ ) 赋予其高反应活性, 易与氨基、巯基等亲核基团发生加成反应。

#### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物是硫代葡萄糖苷酶水解产物的衍生物, 在植物防御系统和人类营养研究中具有重要价值。其异硫氰酸酯基团可通过共价修饰蛋白质的赖氨酸残基, 调控酶活性或信号通路, 因此在生物共价标记和药物开发领域备受关注。此外, 甲基硫醚结构可能增强其脂溶性, 促进跨膜运输。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发中, 本品常用于构建抗癌药物先导化合物, 特别是针对乳腺癌和前列腺癌的靶向治疗分子。农业领域用于开发环境友好型杀虫剂, 其衍生物可干扰害虫的呼吸链代谢。分析化学中作为 HPLC 衍生化试剂, 用于检测生物样本中的氨基化合物。此外, 在蛋白质组学研究中, 它是不可逆酶抑制剂的合成中间体。

#### 4. 储存条件与使用建议

需严格密封保存于  $-20^{\circ}C$  至  $4^{\circ}C$  的惰性气体 (如氩气) 环境中, 避免光照和湿气。开封后建议分装使用, 剩余试剂需用隔水隔氧密封膜处理。操作时应在通风橱中进行, 佩戴防化手套和护目镜。溶解推荐使用无水 DMF 或乙腈, 避免与强氧化剂、强酸强碱共存。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 验证纯度  $>96\%$ , GC-MS 检测无重金属残留。急性毒性数据 LD<sub>50</sub> (大鼠经口) 为 320 mg/kg, 属于 GHS 分类中的急性毒性 3 类。接触皮肤可能引起红肿

和灼伤，应急处理需立即用大量清水冲洗 15 分钟。废弃处置应遵照当地危险化学品管理条例，禁止直接排入下水道。

(全文共计 498 字)