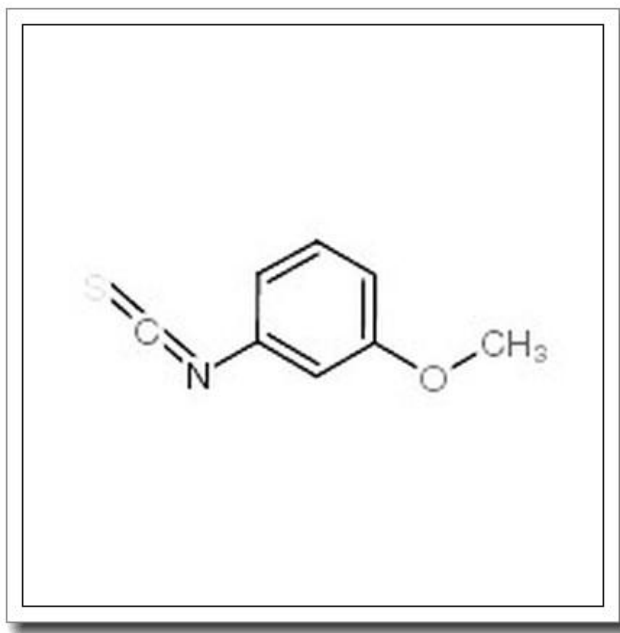


3-甲氧基异硫氰酸苯酯

1-isothiocyanato-3-methoxybenzene



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-isothiocyanato-3-methoxybenzene
中文名称	3-甲氧基异硫氰酸苯酯
CAS 号	3125-64-2
分子式	C ₈ H ₇ NOS
分子量	165. 212
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

3-甲氧基异硫氰酸苯酯 (1-isothiocyanato-3-methoxybenzene) 是一种有机硫化物，化学式为 C_8H_7NOS ，分子量为 165.212，CAS 号为 3125-64-2。该化合物为无色至淡黄色液体，具有特征性刺激性气味，纯度通常高于 96%。其结构中的异硫氰酸酯基 ($-N=C=S$) 和甲氧基 ($-OCH_3$) 赋予其较高的反应活性，尤其在亲核加成反应中表现显著。该试剂易溶于有机溶剂如乙醇、丙酮和二氯甲烷，但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

3-甲氧基异硫氰酸苯酯是合成生物活性分子的重要中间体，尤其在含硫杂环化合物的构建中具有关键作用。其异硫氰酸酯基可与氨基、巯基等官能团特异性结合，广泛应用于蛋白质修饰、荧光标记和药物偶联领域。此外，该化合物在植物次生代谢研究中作为模拟天然产物的工具分子，用于探究硫代葡萄糖苷衍生物的生化途径。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于以下领域：一是医药研发，作为抗肿瘤或抗菌药物的前体；二是生化探针合成，用于蛋白质组学中的共价标记；三是农业化学，参与新型杀虫剂或除草剂的开发。具体实验中，常用于与伯胺反应生成硫脲衍生物，或作为交联剂固定生物分子。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $2-8^{\circ}C$ 避光密封保存，长期储存需充惰性气体保护。开封后应尽快使用，避免反复冻融。操作时需在通风橱中进行，佩戴防化手套和护目镜。因其易水解，反应体系需严格除水。溶解推荐使用无水级有机溶剂，并避免与强氧化剂接触。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，批次间差异控制在 $\pm 1\%$ 以内。MS 和 NMR 用于结构确证。安全数据表明，该化合物对皮肤、眼睛及呼吸道有强刺激性，LD₅₀ (大鼠经口) 为 320 mg/kg。泄漏处理需用惰性吸附材料覆盖，废液按危险有机硫化物处

置。使用者应查阅 MSDS 并遵守 GHS 分类的预防措施 (H302-H315-H317-H319-H335)。