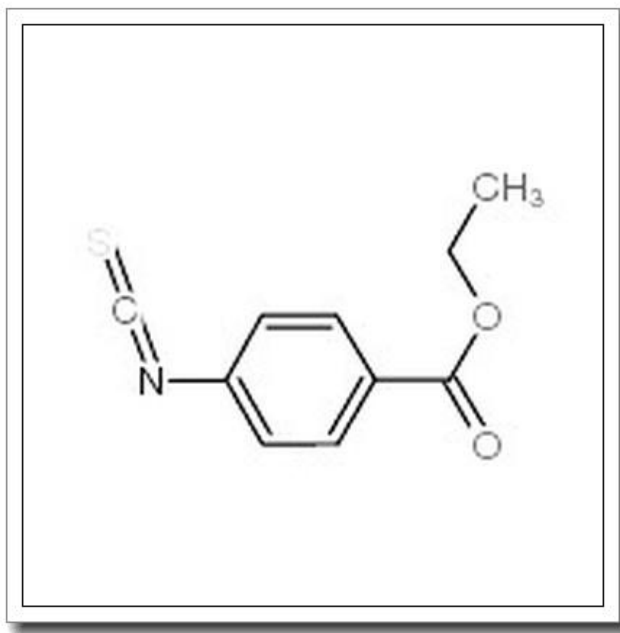


4-乙氧羰基苯基硫代异氰酸酯

ethyl 4-isothiocyanatobenzoate



产品基本信息

属性	值
化学名称	ethyl 4-isothiocyanatobenzoate
中文名称	4-乙氧羰基苯基硫代异氰酸酯
CAS 号	1205-06-7
分子式	C ₁₀ H ₉ N ₀ S
分子量	207. 249
纯度	>96%

产品说明

4-乙氧羰基苯基硫代异氰酸酯 (ethyl 4-isothiocyanatobenzoate) 产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至淡黄色结晶性粉末，化学名称为 ethyl 4-isothiocyanatobenzoate，CAS 号 1205-06-7，分子式 $C_{10}H_9N_0S_2$ ，分子量 207.249。其结构中包含异硫氰酸酯基团 ($-N=C=S$) 和苯甲酸乙酯基团，赋予其高反应活性。纯度经 HPLC 验证 $\geq 96\%$ ，熔点为 $78-82^{\circ}C$ ，易溶于有机溶剂如二甲基亚砜 (DMSO) 和乙醇，微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

异硫氰酸酯类化合物在生物化学中广泛用于蛋白质修饰和交联反应。本产品可通过 $-N=C=S$ 基团与氨基 ($-NH_2$)、巯基 ($-SH$) 等亲核基团特异性结合，形成硫脲或硫代氨基甲酸酯结构。这一特性使其成为蛋白质标记、抗体偶联及小分子探针合成的关键中间体，尤其在荧光标记和靶向药物开发中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品适用于以下领域：

- (1) 蛋白质组学研究：用于共价标记蛋白质的赖氨酸残基，辅助质谱分析或荧光检测。
- (2) 抗体-药物偶联物 (ADC) 开发：作为连接子前体，桥接抗体与细胞毒性药物。
- (3) 有机合成：构建含硫杂环化合物或功能化高分子材料。
- (4) 生物传感器：修饰电极表面以增强信号捕获灵敏度。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 $-20^{\circ}C$ 干燥环境中，避免光照及湿气。开封后需充入惰性气体 (如氮气) 保护。使用时需在通风橱中操作，佩戴防护手套和护目镜。溶解推荐使用无水 DMSO 或 DMF，配制后溶液建议现配现用，长期储存可能导致水解失效。

5. 质量控制与安全信息

本产品经质谱 (MS) 和核磁共振 (NMR) 验证结构, HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ 。含微量水分 ($\leq 0.5\%$)。安全提示: 异硫氰酸酯具有刺激性, 接触皮肤或黏膜可能引发炎症。如不慎接触, 立即用大量清水冲洗并就医。废弃物需按危险化学品规范处置。MSDS 可随货提供。

注: 本说明基于现有实验数据编制, 具体应用需结合用户实验体系优化条件。