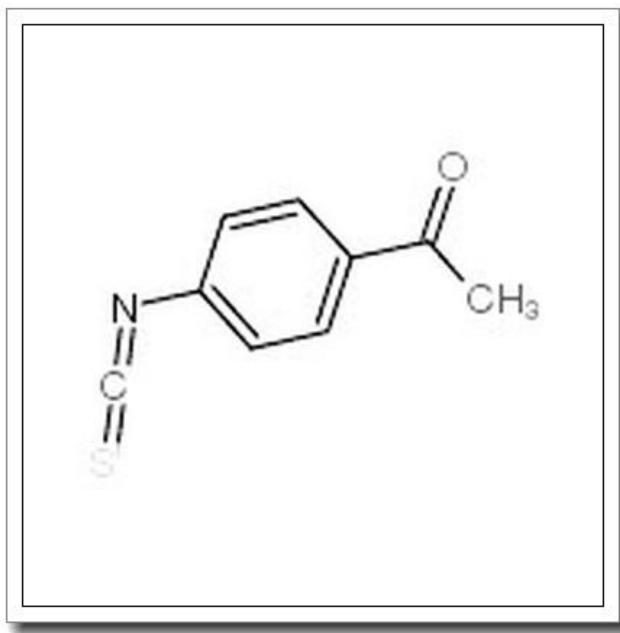


4-乙酰苯基硫氰酸酯

1-(4-isothiocyanatophenyl)ethanone



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-(4-isothiocyanatophenyl)ethanone
中文名称	4-乙酰苯基硫氰酸酯
CAS 号	2131-57-9
分子式	C ₉ H ₇ NOS
分子量	177.223
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

4-乙酰苯基硫氰酸酯 (1-(4-isothiocyanatophenyl)ethanone) 是一种有机硫化合物, CAS 号为 2131-57-9, 分子式为 C_9H_7NOS , 分子量为 177.223。该化合物为白色至浅黄色结晶或粉末, 纯度通常高于 96%。其结构中包含乙酰基和硫氰酸酯基团, 具有较高的反应活性, 尤其在亲核取代反应中表现突出。该化合物在有机溶剂 (如二甲基亚砷、乙醇) 中溶解性良好, 但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

4-乙酰苯基硫氰酸酯因其独特的硫氰酸酯基团, 在生物化学领域常作为交联剂或标记试剂使用。硫氰酸酯基团可与蛋白质、多肽或其他含氨基的生物分子发生特异性反应, 形成稳定的硫脲键。这一特性使其在蛋白质修饰、抗体标记和生物共轭化学中具有重要价值。此外, 该化合物还可用于合成具有生物活性的杂环化合物, 如噻唑类衍生物。

3. 主要应用领域与具体用途

该化合物广泛应用于生物化学研究、药物开发和材料科学领域。具体用途包括:

- 蛋白质交联与标记: 用于抗体、酶或其他生物大分子的共价修饰。
- 药物中间体: 作为合成抗菌剂、抗肿瘤药物的重要前体。
- 材料科学: 用于制备功能化高分子材料或表面修饰。
- 分析化学: 作为衍生化试剂, 用于高效液相色谱 (HPLC) 或质谱分析中的样品预处理。

4. 储存条件与使用建议

为确保产品稳定性, 建议将 4-乙酰苯基硫氰酸酯储存于 2-8°C 的干燥环境中, 避免光照和潮湿。开封后需充入惰性气体 (如氮气) 保护, 并密封保存。使用时需在通风良好的环境下操作, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。建议佩戴防护手套、护目镜和实验服, 并在化学通风橱中进行称量和反应。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过高效液相色谱（HPLC）和核磁共振（NMR）严格检测，纯度>96%。安全信息如下：

- 该化合物可能对皮肤、眼睛和呼吸道有刺激性，操作时需严格遵守实验室安全规范。
- 如不慎接触，立即用大量清水冲洗，并寻求医疗帮助。
- 废弃处理需符合当地环保法规，建议通过专业化学品回收机构处置。