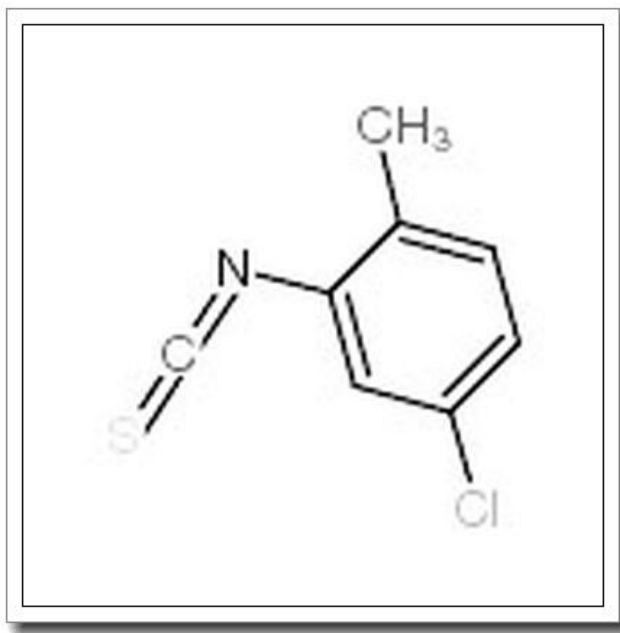


5-氯-2-甲基异硫氰酸苯酯

4-chloro-2-isothiocyanato-1-methylbenzene



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-chloro-2-isothiocyanato-1-methylbenzene
中文名称	5-氯-2-甲基异硫氰酸苯酯
CAS 号	19241-36-2
分子式	C ₈ H ₆ ClNS
分子量	183.658
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

4-氯-2-异硫氰酸基-1-甲基苯 (4-chloro-2-isothiocyanato-1-methylbenzene)，中文名称为 5-氯-2-甲基异硫氰酸苯酯，是一种有机硫化合物，化学式为 C_8H_6ClNS ，分子量为 183.658。该化合物为无色至淡黄色液体或固体，具有刺激性气味，易溶于有机溶剂如乙醇、丙酮和二甲基亚砜 (DMSO)。其 CAS 号为 19241-36-2，纯度通常高于 96%，适合用于生化研究和工业应用。异硫氰酸酯基团 ($-N=C=S$) 是该化合物的关键功能团，赋予其高反应活性，尤其在蛋白质修饰和偶联反应中表现突出。

2. 生物化学功能与重要性

5-氯-2-甲基异硫氰酸苯酯是一种重要的生物偶联试剂，能够与蛋白质、多肽和氨基化合物中的伯氨基 ($-NH_2$) 发生特异性反应，形成稳定的硫脲键。这一特性使其广泛应用于蛋白质标记、抗体修饰和生物分子交联等领域。此外，该化合物在药物开发和生物传感器构建中也具有重要作用，可用于小分子探针的合成或靶向递送系统的设计。

3. 主要应用领域与具体用途

该试剂主要用于生物化学和分子生物学研究，具体用途包括：蛋白质共价标记、荧光探针合成、抗体-药物偶联物 (ADC) 的制备，以及固定化酶的载体修饰。在工业领域，它可用于高分子材料的交联剂或功能化单体。此外，其衍生物在农药和医药中间体合成中也有潜在应用价值。

4. 储存条件与使用建议

建议将本品置于干燥、避光的环境中，储存温度为 $2-8^{\circ}C$ ，避免与湿气或强氧化剂接触。开封后需充入惰性气体 (如氮气) 以延长保存期限。使用时应在通风橱中操作，佩戴防护手套、护目镜和实验服，避免直接吸入蒸气或接触皮肤。溶解时推荐使用无水有机溶剂，并严格控制反应条件以防止副反应。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和 NMR 验证纯度，确保批次间一致性。其安全数据表（SDS）标明为刺激性物质，可能引起皮肤、眼睛和呼吸道刺激。若不慎接触，应立即用大量清水冲洗，并寻求医疗帮助。废弃物需按危险化学品规范处置，禁止直接排放至下水道或环境中。运输时需符合 UN2810 标准，标注为 6.1 类有毒物质。