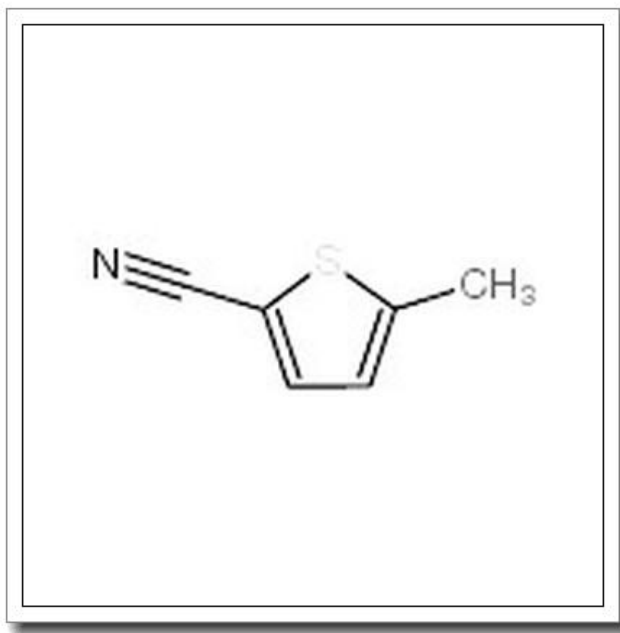


5-甲基噻吩-2-甲腈

5-Methylthiophene-2-carbonitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	5-Methylthiophene-2-carbonitrile
中文名称	5-甲基噻吩-2-甲腈
CAS 号	72835-25-7
分子式	C ₆ H ₅ NS
分子量	123.176
纯度	>96%

产品说明

5-甲基噻吩-2-甲腈 (5-Methylthiophene-2-carbonitrile) 产品说明书

1. 产品概述与化学特性

5-甲基噻吩-2-甲腈是一种含硫杂环化合物，化学式为 C_6H_5NS ，分子量 123.176，CAS 号为 72835-25-7。本品为无色至淡黄色液体或结晶，纯度 >96%，具有噻吩环特有的芳香性与氰基的极性特征。其结构中甲基与氰基的协同效应使其兼具亲脂性与反应活性，易参与亲核取代、环加成等反应，是合成复杂有机分子的重要中间体。

2. 生物化学功能与重要性

作为噻吩类衍生物，该化合物在生物活性分子设计中具有核心地位。噻吩环可模拟苯环的生物电子分布，同时硫原子的引入增强了与金属离子或酶活性中心的结合能力。氰基则提供了进一步功能化修饰的位点，使其在药物化学（如抗炎、抗肿瘤先导化合物）和农药研发（杀虫剂、杀菌剂）中成为关键砌块。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药领域，本品用于合成非甾体抗炎药 (NSAIDs) 的噻吩类似物及酪氨酸激酶抑制剂。材料科学中，可作为有机半导体材料（如 OLED 发光层）的前体。农业化学方面，参与构建新型杀虫剂的杂环核心结构。此外，在分析化学中可用作衍生化试剂，提升含硫化合物的检测灵敏度。

4. 储存条件与使用建议

需密封保存于阴凉干燥处，推荐温度 2-8°C，避免光照与湿气。长期储存建议充氮保护。使用时应佩戴防护手套、护目镜，于通风橱中操作。溶解性测试表明其易溶于乙醇、二氯甲烷，微溶于水，反应体系需严格除水以避免氰基水解。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC 确保纯度 >96%，GC-MS 验证无重金属残留。急性毒性数据 (LD50 大鼠经口)：约 500 mg/kg，属于有害物质。皮肤接触可能引起刺激，吸入粉尘或蒸气会导致呼吸道不适。泄漏处理需用惰性吸附材料覆盖，按危险废弃物处置。安全技术说明书 (MSDS) 备案，请严格遵循当地法规使用。

(注: 本说明基于现有研究数据, 实际应用前请进行小试验证。)