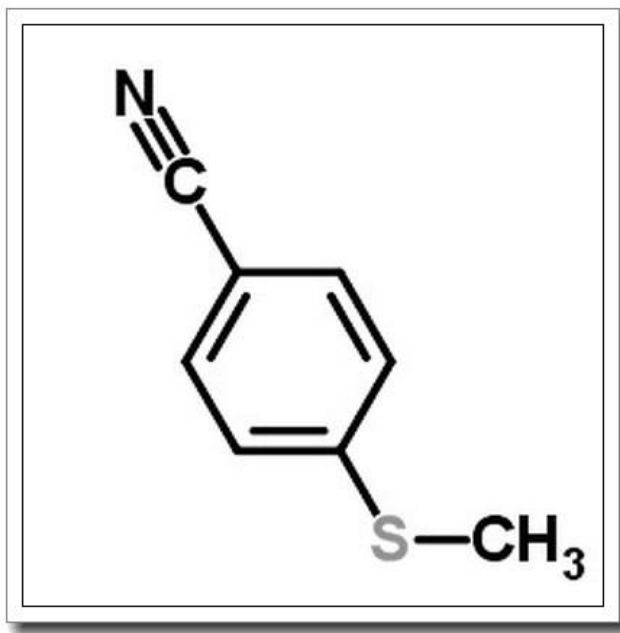


对甲硫基苯甲腈

4-methylsulfanylbenzonitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-methylsulfanylbenzonitrile
中文名称	对甲硫基苯甲腈
CAS 号	21382-98-9
分子式	C ₈ H ₇ NS
分子量	149.213
纯度	>96%

产品说明

4-甲硫基苯甲腈产品说明书

产品概述与化学特性

4-甲硫基苯甲腈 (4-methylsulfanylbenzotrile) 是一种含硫芳香族化合物，化学式为 C_8H_7NS ，分子量为 149.213，CAS 号为 21382-98-9。本品为白色至淡黄色结晶或粉末，纯度高于 96%，具有典型的腈类特征气味。其结构中甲硫基 (-SCH₃) 与苯环共轭，赋予其独特的化学反应性，尤其在亲核取代和氧化反应中表现显著。该化合物易溶于有机溶剂如乙醇、丙酮和乙醚，微溶于水。

生物化学功能与重要性

作为苯甲腈衍生物，4-甲硫基苯甲腈是合成多种生物活性分子的关键中间体。其甲硫基可作为后续修饰的活性位点，例如通过氧化转化为亚砷或砷类化合物。在药物化学中，此类结构常见于抗菌剂、抗肿瘤药物的研发。此外，其腈基 (-CN) 在催化加氢或水解反应中可转化为胺或羧酸，扩展了其在精细化工中的应用价值。

主要应用领域与具体用途

1. 医药中间体：用于合成含硫杂环类药物，如非甾体抗炎药或酪氨酸激酶抑制剂。
2. 农药合成：作为除草剂或杀虫剂的前体，例如含硫苯甲酰胺类化合物的制备。
3. 材料科学：参与液晶材料或高分子单体的合成，改善材料的热稳定性与光学性能。
4. 科研试剂：在有机合成方法学研究中，作为模型底物验证新催化体系的效率。

储存条件与使用建议

本品需避光密封保存于干燥阴凉处，建议温度 2-8°C，相对湿度低于 60%。开封后需充惰性气体（如氮气）保护以延长稳定性。使用时应佩戴防护手套、护目镜及防毒面具，避免吸入粉尘或接触皮肤。实验操作需在通风橱中进行，远离强氧化剂与酸碱。

质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，水分含量低于 0.5%，重金属残留符合 ACS 标准。
安全数据表明，其急性毒性（LD50 大鼠经口）为 1200 mg/kg，属于低毒类，但长期暴露可能引起呼吸道刺激。废弃物处置需遵循当地法规，建议采用焚烧法处理。
详细安全信息请参阅随附的 MSDS（材料安全数据表）。