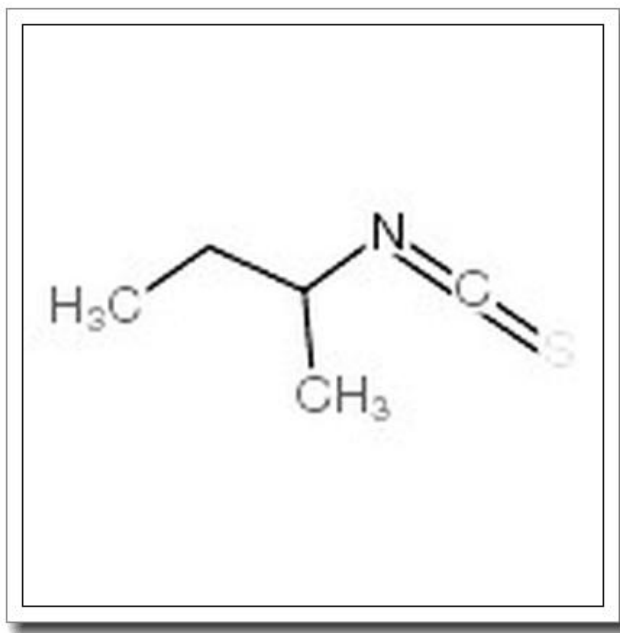


异硫氰酸仲丁酯

Isothiocyanic Acid Sec-Butyl Ester



产品基本信息

属性	值
化学名称	Isothiocyanic Acid Sec-Butyl Ester
中文名称	异硫氰酸仲丁酯
CAS 号	4426-79-3
分子式	C ₅ H ₉ NS
分子量	115.197
纯度	>96%

产品说明

异硫氰酸仲丁酯产品说明

1. 产品概述与化学特性

异硫氰酸仲丁酯 (Isothiocyanic Acid Sec-Butyl Ester) 是一种有机硫化合物, 化学式为 C_5H_9NS , 分子量为 115.197, CAS 号为 4426-79-3。本品为无色至淡黄色液体, 具有刺激性气味, 纯度高于 96%。其分子结构中的异硫氰酸酯基团 ($-N=C=S$) 赋予其高反应活性, 易与氨基、巯基等亲核基团发生加成反应。该化合物不溶于水, 但可溶于大多数有机溶剂, 如乙醇、乙醚和氯仿。

2. 生物化学功能与重要性

异硫氰酸仲丁酯是植物次生代谢产物硫代葡萄糖苷的水解产物之一, 在十字花科植物中天然存在。研究表明, 此类化合物具有显著的生物活性, 包括抗菌、抗肿瘤和抗氧化作用。其机制可能与抑制细胞周期、诱导凋亡及调节相关信号通路有关, 因此在药物开发和功能食品研究中备受关注。

3. 主要应用领域与具体用途

本品广泛应用于有机合成、农药中间体及生物医学研究领域。在有机合成中, 可作为构建杂环化合物或功能化修饰的中间体。在农药领域, 其衍生物可用于开发新型杀虫剂或杀菌剂。此外, 在生物医学研究中, 异硫氰酸仲丁酯常作为模型化合物, 用于探究异硫氰酸酯类物质的药理活性及作用机制。

4. 储存条件与使用建议

本品需密封保存于阴凉、干燥、通风良好的环境中, 避免光照和高温, 推荐储存温度为 $2-8^{\circ}C$ 。使用时需在通风橱中操作, 避免直接接触皮肤或吸入蒸气。建议佩戴防护手套、护目镜和防毒面具。若发生泄漏, 应立即用惰性吸附材料处理, 并用大量水冲洗污染区域。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过气相色谱 (GC) 检测, 纯度 $\geq 96\%$ 。运输及使用需符合化学品安全管理规范, UN 编号及危险类别详见安全技术说明书 (MSDS)。本品对眼睛、皮肤和呼

吸道有刺激性，接触后应立即用清水冲洗至少 15 分钟，并就医处理。废弃处置需遵循当地环保法规，不可直接排入下水道或环境中。