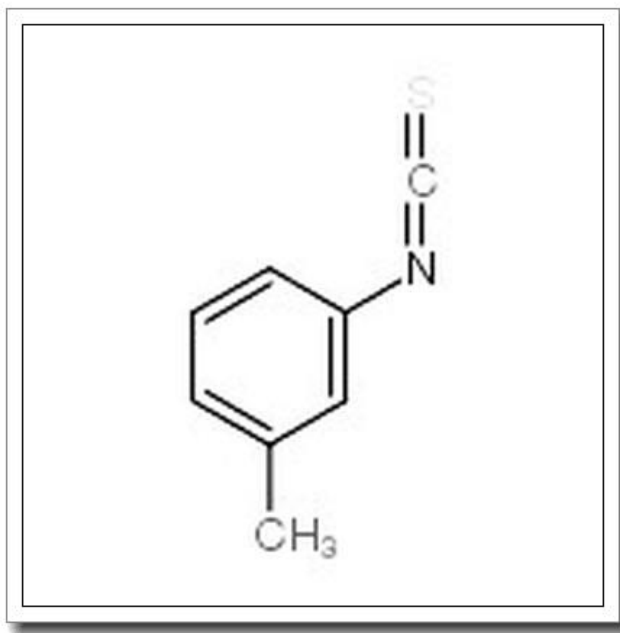


间甲苯异硫氰酸酯

3-Methylphenyl isothiocyanate



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-Methylphenyl isothiocyanate
中文名称	间甲苯异硫氰酸酯
CAS 号	621-30-7
分子式	C ₈ H ₇ NS
分子量	149.213
纯度	>96%

产品说明

3-甲基苯基异硫氰酸酯 (3-Methylphenyl isothiocyanate) 产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3-甲基苯基异硫氰酸酯是一种有机硫化物，化学式为 C_8H_7NS ，分子量为 149.213，CAS 号为 621-30-7。该化合物常温下为无色至淡黄色液体，具有刺激性气味，易溶于有机溶剂如乙醇、乙醚和丙酮，微溶于水。其纯度通常高于 96%，结构中的异硫氰酸酯基团 ($-N=C=S$) 赋予其高反应活性，可与氨基、羟基等官能团发生特异性反应。

2. 生物化学功能与重要性

作为异硫氰酸酯类化合物，3-甲基苯基异硫氰酸酯在生物化学中表现出显著的亲电性，能够与蛋白质中的巯基或氨基结合，从而影响酶活性和细胞信号通路。此类化合物在植物防御系统中天然存在（如芥子油苷水解产物），并因其潜在的抗癌和抗炎特性成为研究热点。

3. 主要应用领域与具体用途

该试剂广泛应用于有机合成、药物研发及生物标记领域。在药物化学中，它是合成噻唑烷酮类化合物的关键中间体；在蛋白质组学中，可用于修饰肽段以增强质谱检测灵敏度。此外，还可作为农药中间体或功能材料的前体。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $2-8^{\circ}C$ 避光密封保存，避免与湿气、强氧化剂接触。使用时需在通风橱中操作，佩戴防护手套、护目镜及防毒面具。开封后建议充氮保护以延长稳定性。长期储存需定期检测纯度。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 验证纯度，批次间一致性严格控制在 $\pm 1\%$ 以内。其安全数据 (SDS) 标明为刺激性物质 (GHS 分类: 皮肤腐蚀/刺激类别 2)，接触后需立即用大量清水冲洗。废弃物应作为有害化学品处理，遵守当地环保法规。运输时需贴腐蚀性标签，UN 编号为 2810。

注：以上信息基于当前研究数据，实际应用前请查阅最新文献并开展小规模预实验验证。