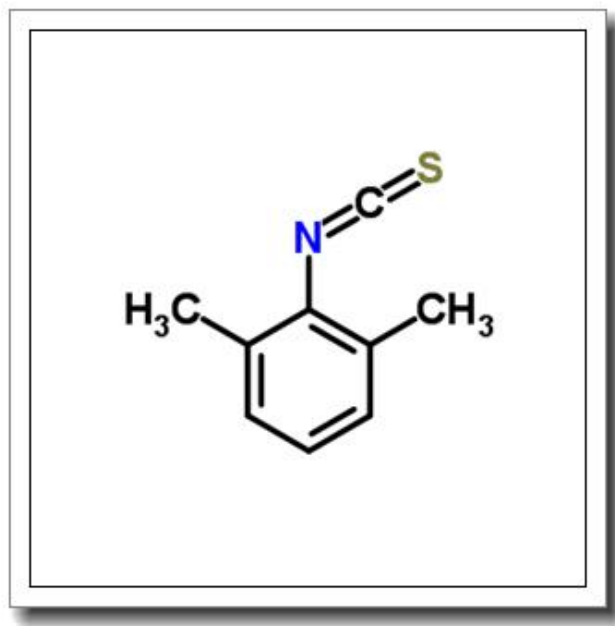


2,6-二甲基异硫氰酸苯酯

2-isothiocyanato-1,3-dimethylbenzene



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-isothiocyanato-1,3-dimethylbenzene
中文名称	2,6-二甲基异硫氰酸苯酯
CAS 号	19241-16-8
分子式	C ₉ H ₉ NS
分子量	163.24
纯度	≥96%

产品说明

2-异硫氰酸-1,3-二甲基苯 (2-isothiocyanato-1,3-dimethylbenzene) 是一种重要的有机合成中间体, 化学式为 C₉H₉NS, 分子量 163.24。该化合物常温下为无色至淡黄色液体, 具有刺激性气味, 需避光保存。其 CAS 号为 19241-16-8, 纯度通常 ≥96%, 在生化试剂领域具有广泛的应用价值。

在生物化学功能方面, 该化合物因其异硫氰酸酯基团 (-N=C=S) 表现出高反应活性, 可与氨基、巯基等亲核基团发生特异性结合。这一特性使其成为蛋白质修饰、荧光标记和共价固定化的重要试剂。其分子中的二甲基苯结构增强了疏水性, 适用于膜蛋白研究等特殊场景。

该产品主要应用于三个领域: 一是作为蛋白质测序的 Edman 降解试剂衍生化中间体, 用于 N 端氨基酸分析; 二是在免疫检测中用于抗体或抗原的偶联标记; 三是作为小分子探针的合成前体, 用于细胞成像或药物靶点研究。在药物研发中, 它常用于构建激酶抑制剂或抗肿瘤化合物的核心骨架。

储存条件要求严格: 需置于 -20℃ 避光保存, 开封后充氮保护以延长保质期。使用建议包括: 操作时佩戴防护手套和护目镜, 在通风橱中进行称量; 溶解时优先选择无水 DMF 或 DMSO 等非质子极性溶剂; 反应体系应避免水分以防止水解失效。

质量控制通过 HPLC 和 NMR 双重验证, 确保杂质含量低于 4%。安全信息显示该化合物对眼睛和皮肤有强刺激性 (GHS 分类 Category 1), 吸入蒸气可能导致呼吸道灼伤。泄漏处理需使用惰性吸附材料, 废弃物应作为有害化学废料处置。建议科研人员在 MSDS 指导下使用, 并配备应急冲洗设备。