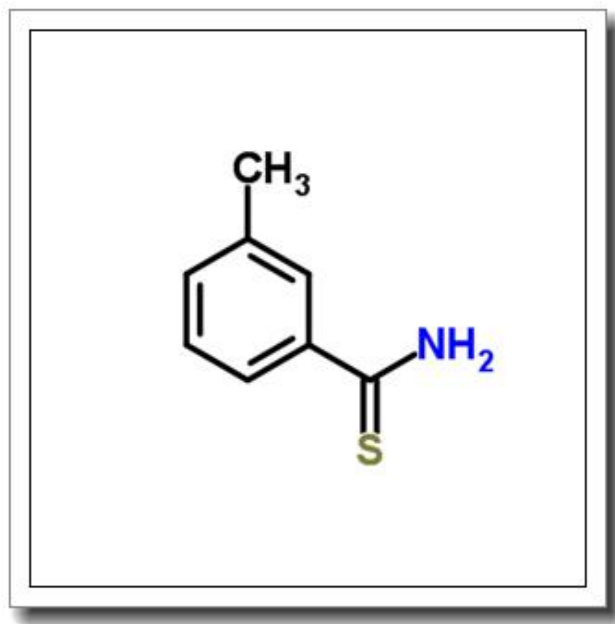


3-甲基苯基硫代甲酰胺

3-methylbenzenecarbothioamide



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-methylbenzenecarbothioamide
中文名称	3-甲基苯基硫代甲酰胺
CAS 号	2362-63-2
分子式	C ₈ H ₉ NS
分子量	151.229
纯度	≥ 96%

产品说明

3-甲基硫代甲酰胺产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3-甲基硫代甲酰胺 (3-methylbenzenecarbothioamide) 是一种含硫芳香族有机化合物，化学式为 C_8H_9NS ，分子量 151.229，CAS 号为 2362-63-2。本品为白色至淡黄色结晶性粉末，纯度 $\geq 96\%$ ，具有特征性硫代酰胺基团 ($-C(=S)-NH_2$)，可溶于常见有机溶剂如乙醇、丙酮，微溶于水。其结构中甲基的引入赋予其特定的疏水性和反应活性，是合成杂环化合物及金属配合物的关键中间体。

2. 生物化学功能与重要性

作为硫代酰胺衍生物，该化合物可通过硫原子与金属离子配位，在催化反应中作为配体使用。其分子中的硫羰基 ($C=S$) 具有高亲核性，可参与缩合、环化等反应，是构建噻唑类、噻吩类药物的核心模块。在生物化学研究中，可用于模拟酶活性中心的金属结合位点，或作为小分子抑制剂研究蛋白质-配体相互作用机制。

3. 主要应用领域与具体用途

医药领域：用于合成抗菌、抗结核药物（如硫代酰胺类衍生物）的前体。

材料科学：作为配体制备荧光探针或光电功能材料。

农业化学：参与开发新型杀虫剂及植物生长调节剂。

分析化学：作为金属离子螯合剂用于痕量元素检测。

4. 储存条件与使用建议

储存于 $2-8^{\circ}C$ 避光干燥环境中，开封后需充惰性气体保护以防氧化。建议在通风橱中操作，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解时优先选用氮气保护的有机溶剂体系，以保持稳定性。长期保存需定期检测纯度（HPLC 推荐）。

5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC、NMR 及元素分析多重验证，水分含量 $\leq 0.5\%$ ，重金属残留符合 ACS 标准。安全数据：急性毒性 (LD50 大鼠口服) 为 1200 mg/kg，属于刺激性物质，操

作时需佩戴护目镜及丁腈手套。若接触眼睛，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置需遵守当地危险化学品法规。

（注：本说明基于现有研究数据，具体应用需结合实验条件优化。）