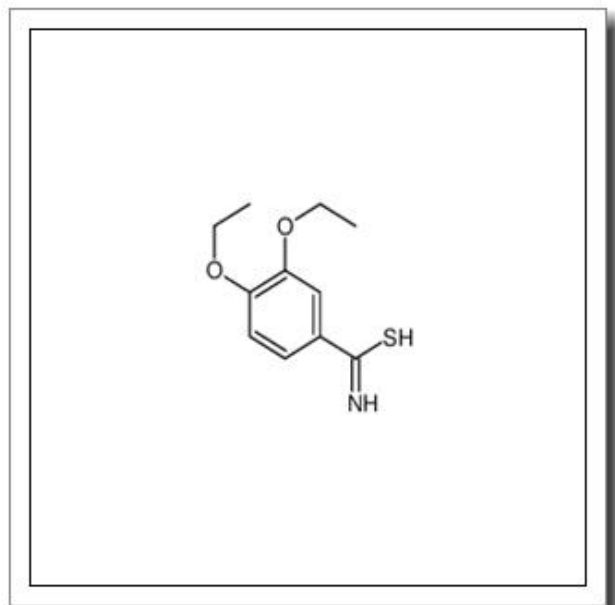


3,4-diethoxybenzenecarbothioamide

3,4-diethoxybenzenecarbothioamide



产品基本信息

属性	值
化学名称	3,4-diethoxybenzenecarbothioamide
中文名称	3,4-二乙氧基苯基硫脲
CAS 号	60759-00-4
分子式	C ₁₁ H ₁₅ N ₀ S ₂
分子量	225.307
纯度	≥96%

产品说明

3,4-二乙氧基苯甲硫代酰胺产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3,4-二乙氧基苯甲硫代酰胺 (3,4-diethoxybenzenecarbothioamide) 是一种含硫芳香族化合物，化学式为 $C_{11}H_{15}N_2O_2S$ ，分子量 225.307。其 CAS 号为 60759-00-4，外观通常为白色至淡黄色结晶粉末。该化合物结构中包含乙氧基和硫代酰胺官能团，赋予其独特的极性和反应活性。纯度标准 $\geq 96\%$ ，可通过 HPLC 或 TLC 验证。

2. 生物化学功能与重要性

作为苯甲酰胺衍生物，该化合物可通过硫代酰胺基团参与金属离子配位或酶抑制反应，在生物体系中表现出调控活性。其乙氧基侧链增强了脂溶性，有利于跨膜传输，因此在药物化学中常作为先导化合物或中间体，用于开发靶向神经系统或代谢酶的抑制剂。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发中，本品用于合成抗癫痫、抗抑郁等中枢神经系统药物；在材料科学中，可作为有机配体构建金属有机框架 (MOF)。此外，其衍生物在农药领域具有潜在杀虫活性。实验室中常用于硫代酰胺类化合物的结构修饰研究。

4. 储存条件与使用建议

需密封保存于 $-20^{\circ}C$ 至 $4^{\circ}C$ 的干燥环境中，避免光照和潮湿。开封后建议充氮保护以延长稳定性。使用时需在通风橱中操作，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明其易溶于 DMSO、甲醇，微溶于水，配制溶液时需选择适宜溶剂。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 GC-MS 和核磁共振 (NMR) 验证结构，批次间一致性控制在 $\pm 2\%$ 以内。安全数据表明，其急性毒性 (LD50) 为大鼠口服 >500 mg/kg，但仍需佩戴防护手套和护目镜。废弃物处理需符合有机硫化合物规范，禁止直接排放至下水道。

(注：实际使用前请查阅最新版 MSDS 并遵循实验室安全规程。)