

4-溴苯基异硫氰酸酯

1-bromo-4-isothiocyanatobenzene

产品图片未找到

产品基本信息

属性	值
化学名称	1-bromo-4-isothiocyanatobenzene
中文名称	4-溴苯基异硫氰酸酯
CAS 号	1985-12-02 00:00:00
分子式	C ₇ H ₄ BrNS
分子量	214.082
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

4-溴苯基异硫氰酸酯 (1-bromo-4-isothiocyanatobenzene) 是一种有机硫化合物，化学式为 C_7H_4BrNS ，分子量为 214.082。该化合物为白色至淡黄色结晶或粉末，具有异硫氰酸酯特有的刺激性气味。其 CAS 号为 1985-12-02，纯度通常不低于 96%。该分子结构包含溴原子和异硫氰酸酯基团 ($-N=C=S$)，使其具有较高的反应活性，尤其在亲核取代反应和偶联反应中表现突出。

2. 生物化学功能与重要性

4-溴苯基异硫氰酸酯在生物化学领域常用于蛋白质修饰和标记，其异硫氰酸酯基团可与蛋白质中的氨基 ($-NH_2$) 或巯基 ($-SH$) 发生特异性反应，形成稳定的硫脲或硫代氨基甲酸酯衍生物。这一特性使其成为蛋白质交联、荧光标记和抗体偶联的重要试剂。此外，该化合物还可作为合成中间体，用于构建更复杂的生物活性分子或药物候选化合物。

3. 主要应用领域与具体用途

该试剂广泛应用于生物化学、药物研发和材料科学领域。在生物化学中，常用于蛋白质或多肽的共价修饰，例如制备荧光探针或免疫检测试剂。在药物化学中，它是合成含溴芳环或硫脲类化合物的关键中间体。此外，还可用于高分子材料的改性，如制备功能性聚合物或表面涂层。

4. 储存条件与使用建议

4-溴苯基异硫氰酸酯需在干燥、避光条件下储存，推荐温度为 $2-8^{\circ}C$ ，长期保存建议充氮气保护以延缓分解。使用时需在通风橱中操作，避免吸入粉尘或蒸气。溶解时可选用无水二甲基亚砜 (DMSO) 或二氯甲烷等有机溶剂。由于其对湿气敏感，开封后应尽快使用并密封保存。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和核磁共振 (NMR) 严格检测，确保纯度 $\geq 96\%$ 。使用时需佩戴防护手套、护目镜和实验服，避免直接接触皮肤或眼睛。若发生接触，立即用大量清

水冲洗并就医。该化合物对水生生物有毒，废弃处理需符合当地环保法规。安全数据表（SDS）可进一步提供毒性、急救措施和运输规范等详细信息。