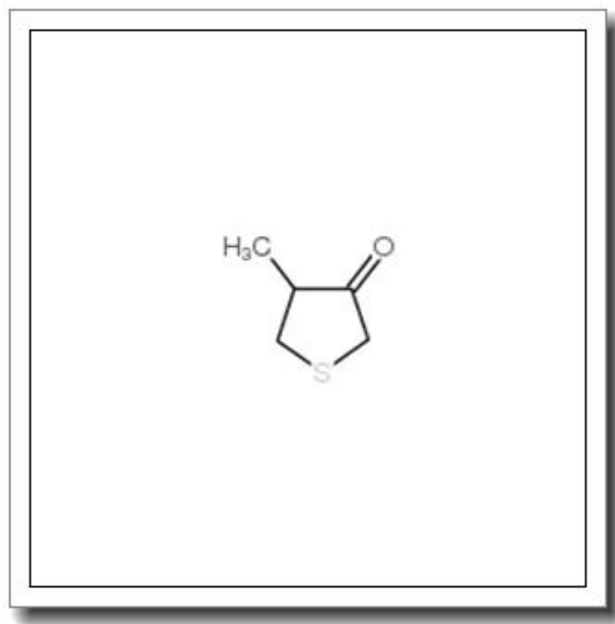


# 4-甲基-3-氧代四氢噻吩

*4-methylthiolan-3-one*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	4-methylthiolan-3-one
中文名称	4-甲基-3-氧代四氢噻吩
CAS 号	50565-25-8
分子式	C <sub>5</sub> H <sub>8</sub> O <sub>2</sub> S
分子量	116.181
纯度	≥ 96%

## 产品说明

### 4-甲基-3-氧代四氢噻吩产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

4-甲基-3-氧代四氢噻吩 (4-methylthiolan-3-one, CAS 号 50565-25-8) 是一种含硫杂环化合物, 分子式为 C<sub>5</sub>H<sub>8</sub>O<sub>S</sub>, 分子量 116.181。其结构特征为四氢噻吩环上 3 位羰基和 4 位甲基取代, 赋予其独特的化学性质。本品为无色至淡黄色液体, 纯度 ≥96%, 具有典型的含硫化合物气味, 易溶于有机溶剂如乙醇、丙酮和乙醚, 微溶于水。

#### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为硫代内酯类衍生物, 在生物化学中常作为合成中间体或结构类似物参与含硫代谢途径的研究。其羰基与硫原子的协同作用使其在模拟天然硫酯键或硫杂环反应中具有重要价值, 尤其在酶抑制剂设计和药物分子修饰领域备受关注。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发中, 本品可用于抗菌剂、抗肿瘤先导化合物的结构优化; 在材料科学中, 可作为功能高分子合成的含硫单体。此外, 在香料工业中, 其特有的硫醚结构可用于调配具有肉香或烤香风味的香精。实验室中常用于有机硫化学机理研究及不对称催化反应的底物开发。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 -20°C 至 4°C 的惰性气体 (如氮气) 环境中, 避光防潮。开封后需尽快使用, 避免反复冻融。操作时应佩戴防化手套、护目镜, 并在通风橱中进行。与强氧化剂、强酸强碱分开存放, 防止发生剧烈反应。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和 GC 双重检测确保纯度, 批次间稳定性控制在 ±1%。安全数据表明, 其急性毒性 (LD<sub>50</sub>) 为大鼠经口 780 mg/kg, 属于刺激性物质 (GHS 分类: Skin Irrit. 2)。如接触皮肤, 立即用大量清水冲洗; 若吸入蒸气, 需转移至空气新鲜处。废弃物处理需符合当地危险化学品管理条例。

(注: 本说明基于现有研究数据, 具体应用需结合实验条件进一步验证。)