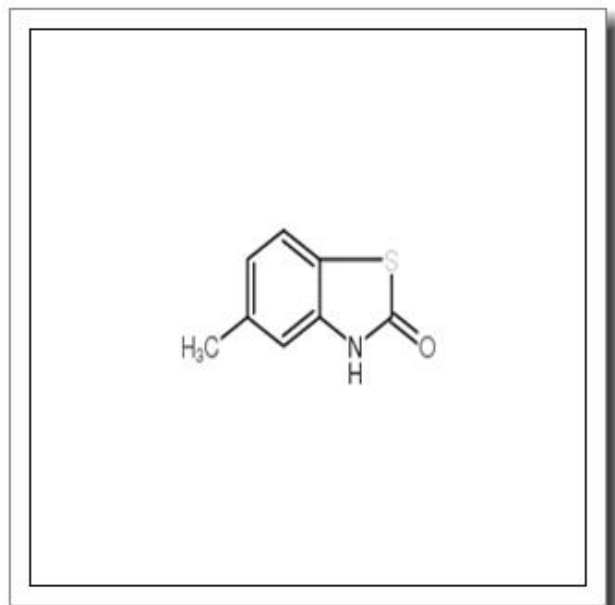


5-Methylbenzo[d]thiazol-2(3H)-one

5-Methylbenzo[d]thiazol-2(3H)-one



产品基本信息

属性	值
化学名称	5-Methylbenzo[d]thiazol-2(3H)-one
中文名称	5-Methylbenzo[d]thiazol-2(3H)-one
CAS 号	40925-61-9
分子式	C ₈ H ₇ NOS
分子量	165.212
纯度	≥96%

产品说明

5-甲基苯并[d]噻唑-2(3H)-酮产品说明书

1. 产品概述与化学特性

5-甲基苯并[d]噻唑-2(3H)-酮 (CAS 号: 40925-61-9) 是一种含硫氮杂环化合物, 分子式为 C_8H_7NOS , 分子量 165.212。本品为白色至淡黄色结晶粉末, 纯度 $\geq 96\%$, 具有典型苯并噻唑酮类结构的特征吸收峰 (如红外光谱中 $1650-1700\text{ cm}^{-1}$ 的羰基伸缩振动)。其结构中甲基与羰基的协同效应使其兼具亲脂性和弱极性, 可溶于常见有机溶剂 (如 DMSO、甲醇), 微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为噻唑酮类衍生物, 该化合物是构建复杂杂环体系的关键中间体。其分子中的活性位点 (C=O 与 N-H) 可参与缩合、烷基化等反应, 在药物化学中用于合成抗菌、抗肿瘤先导化合物。研究表明, 其结构类似物对酪氨酸酶等靶点具有抑制活性, 在生化机制研究中具有潜在价值。

3. 主要应用领域与具体用途

医药研发领域: 用于合成新型抗生素 (如噻唑烷酮类衍生物) 及激酶抑制剂。

材料科学: 作为荧光探针的骨架结构或高分子材料的改性单体。

农业化学: 开发植物生长调节剂或杀虫剂的中间体。

分析检测: 可作为 HPLC 标准品或金属离子螯合剂使用。

4. 储存条件与使用建议

储存于密闭避光容器中, 建议温度 $2-8^{\circ}\text{C}$, 相对湿度 $\leq 60\%$ 。长期保存需充惰性气体保护。使用前需平衡至室温, 避免反复冻融。实验操作应在通风橱中进行, 佩戴防护手套及护目镜。溶解时优先选用 DMSO (浓度 $\leq 10\text{ mM}$), 水溶液需现配现用。

5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC 归一化法检测纯度, 批号关联 COA 报告。危险代码: H315-H319 (造成皮肤和眼刺激), 安全措施包括立即冲洗接触部位, 如吸入需移至空气新鲜处。废

弃物处置应符合当地法规，不可直接排入下水道。运输分类为非危险化学品，但需避免与强氧化剂共存。

（注：本说明基于现有研究数据，具体应用需进一步实验验证。产品规格以实际检测报告为准。）