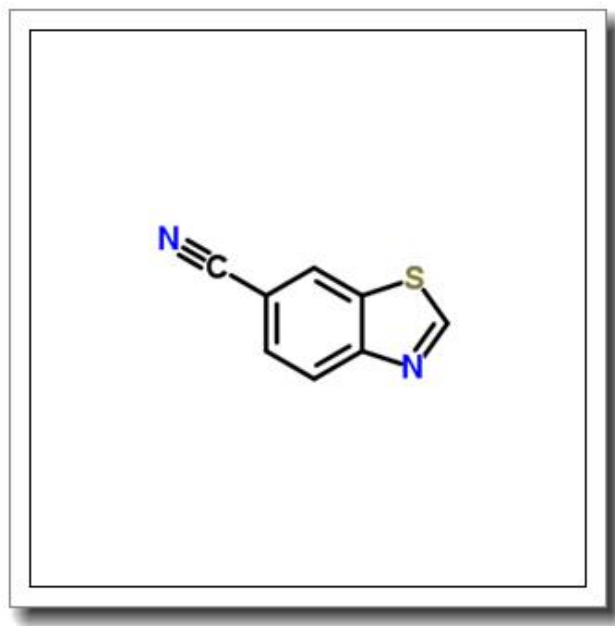


# 苯并噻唑-6-腈

*6-Cyanobenzothiazole*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	6-Cyanobenzothiazole
中文名称	苯并噻唑-6-腈
CAS 号	58249-61-9
分子式	C <sub>8</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub> S
分子量	160.196
纯度	≥ 96%

## 产品说明

### 6-Cyanobenzothiazole (苯并噻唑-6-腈) 产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

6-Cyanobenzothiazole 是一种含氰基的苯并噻唑衍生物，化学式为  $C_8H_4N_2S$ ，分子量为 160.196，CAS 号为 58249-61-9。本品为白色至淡黄色结晶性粉末，纯度  $\geq 96\%$ ，具有典型的芳香杂环化合物特性。其结构中氰基与苯并噻唑环的共轭体系赋予其独特的电子效应，使其在有机合成和材料科学中表现出高反应活性。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为苯并噻唑类化合物的关键中间体，6-Cyanobenzothiazole 在荧光探针设计和药物研发中具有重要作用。其噻唑环可作为氢键受体参与分子识别，而氰基能通过点击化学进一步功能化。该分子是合成荧光素酶底物（如 D-荧光素）的前体，在生物发光成像领域不可或缺。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

在医药领域，本品用于构建抗肿瘤和抗菌药物的杂环骨架；在材料科学中，可作为有机发光二极管（OLED）的电子传输层材料。此外，它还是以下反应的关键原料：

- 与半胱氨酸衍生物缩合制备生物发光标记物
- 作为配体参与过渡金属催化反应
- 合成具有光电活性的共轭聚合物

#### 4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于干燥、避光的惰性环境中，长期储存温度应低于  $-20^{\circ}C$ 。开封后需充氮保护，避免吸湿降解。使用时需在通风橱中操作，避免与强氧化剂接触。溶解性测试表明，本品易溶于二甲基亚砜（DMSO）、N,N-二甲基甲酰胺（DMF），微溶于乙醇。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度  $\geq 96\%$ ，重金属含量  $< 10\text{ppm}$ 。安全数据表明，其急性毒性（LD50 大鼠口服）为  $320\text{mg/kg}$ ，属于有害物质。操作时应佩戴防护手套、护目镜

及防尘口罩，若接触皮肤需立即用大量清水冲洗。废弃物处置需符合当地危险化学品管理法规。

注：本说明基于现有研究数据编制，具体应用需结合实验条件优化。更多技术参数可索取 COA（分析证书）。