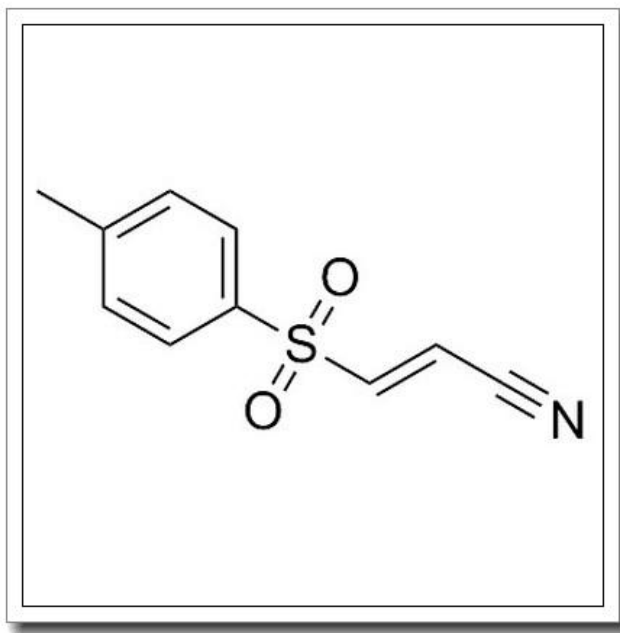


(E)-3-(对甲苯磺酰基)丙烯腈

(E)-3-tosylacrylonitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	(E)-3-tosylacrylonitrile
中文名称	(E)-3-(对甲苯磺酰基)丙烯腈
CAS 号	19542-67-7
分子式	C ₁₀ H ₉ N ₀ S ₂
分子量	207.249
纯度	>96%

产品说明

(E)-3-对甲苯磺酰基丙烯腈产品说明书

1. 产品概述与化学特性

(E)-3-对甲苯磺酰基丙烯腈 ((E)-3-tosylacrylonitrile) 是一种含磺酰基和氰基的 α, β -不饱和化合物, 化学式为 $C_{10}H_9NO_2S$, 分子量 207.249, CAS 号为 19542-67-7。其结构特征为对甲苯磺酰基与丙烯腈基团通过反式双键 (E 构型) 连接, 赋予分子显著的亲电性和共轭效应。常温下呈白色至淡黄色结晶粉末, 纯度 >96%, 易溶于极性有机溶剂 (如 DMF、DMSO), 微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为迈克尔受体, 可通过双键与亲核试剂 (如硫醇、胺类) 发生共轭加成反应, 是构建含磺酰基杂环化合物 (如噻唑、吡啶衍生物) 的关键中间体。其磺酰基可增强反应活性, 而氰基则提供进一步官能团转化的位点, 在药物化学中常用于引入药效团或调节分子极性。

3. 主要应用领域与具体用途

在有机合成领域, 本品广泛应用于:

- (1) 医药中间体合成, 如抗肿瘤、抗炎药物先导化合物的制备;
- (2) 功能材料前驱体, 用于制备光电材料或聚合物单体;
- (3) 生物探针修饰, 通过磺酰基与生物分子特异性结合。典型反应包括环化反应、亲核取代及过渡金属催化偶联等。

4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中, 避光、防潮, 建议温度 2-8°C。长期保存需充惰性气体保护。使用时需在通风橱中操作, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解建议使用干燥 DMF 或丙酮, 反应体系需严格除水以提高产率。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 残余溶剂符合 ICH 标准。安全数据: 急性毒性 (口服 LD₅₀) >500 mg/kg (大鼠), 对眼睛和皮肤有刺激性。操作时需佩戴防护手

套、护目镜及防尘口罩，若接触立即用大量清水冲洗。废弃物应作为有害化学品处置，遵守当地环保法规。

注：具体实验方案请参考最新文献或咨询专业技术支持。