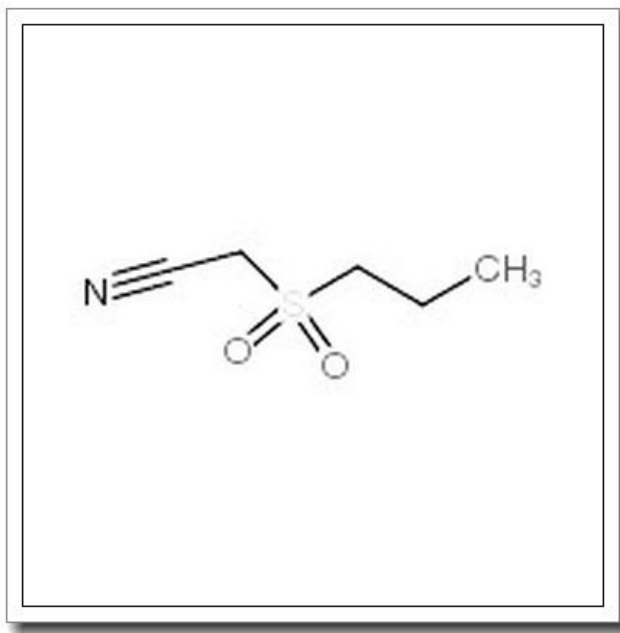


2-丙烷磺酰基乙腈

2-propan-2-ylsulfonylacetonitrile



产品基本信息

| 属性 | 值 |
|-------|---|
| 化学名称 | 2-propan-2-ylsulfonylacetonitrile |
| 中文名称 | 2-丙烷磺酰基乙腈 |
| CAS 号 | 120069-21-8 |
| 分子式 | C ₅ H ₉ N ₂ O ₂ S |
| 分子量 | 147.195 |
| 纯度 | >96% |

产品说明

1. 产品概述与化学特性

2-丙烷磺酰基乙腈 (2-propan-2-ylsulfonylethanone nitrile) 是一种有机硫化合物，化学式为 $C_5H_9NO_2S$ ，分子量为 147.195，CAS 号为 120069-21-8。该化合物以白色至类白色结晶或粉末形式存在，纯度通常高于 96%。其结构中包含磺酰基和氰基官能团，赋予其独特的化学性质，如较高的极性和反应活性。该化合物易溶于极性有机溶剂（如甲醇、乙腈），但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

2-丙烷磺酰基乙腈在生物化学领域常作为中间体或修饰基团参与有机合成反应。其磺酰基和氰基的协同作用使其成为构建复杂分子（如药物活性片段或功能材料）的重要砌块。此外，该化合物在酶抑制剂设计和蛋白质修饰研究中具有一定潜力，因其可特异性与生物分子中的巯基或氨基发生反应。

3. 主要应用领域与具体用途

该化合物广泛应用于医药研发、农药合成及材料科学领域。在医药化学中，它可用于合成磺酰胺类或含氰基的活性分子；在农药领域，可作为杀虫剂或除草剂的中间体；在材料科学中，可用于制备功能性聚合物或表面修饰剂。具体实验用途包括但不限于：亲核取代反应的底物、金属催化偶联反应的配体前体。

4. 储存条件与使用建议

建议将本品置于干燥、阴凉处密封保存，避免光照和潮湿环境，长期储存需在惰性气体（如氮气）保护下。使用时应穿戴防护手套、护目镜及实验服，在通风橱中操作。避免与强氧化剂或强酸接触，以防剧烈反应。开封后建议尽快使用，剩余部分需严格密封。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测，纯度 $\geq 96\%$ ，并提供批次相关的质检报告 (COA)。其急性毒性数据（如 LD50）需参考具体实验数据，操作时需遵守化学品通用安全规范。

若接触皮肤或眼睛，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地环保法规，不可直接排放至下水道。

（注：以上信息基于现有数据，实际应用前请查阅最新文献或进行小试验证。）