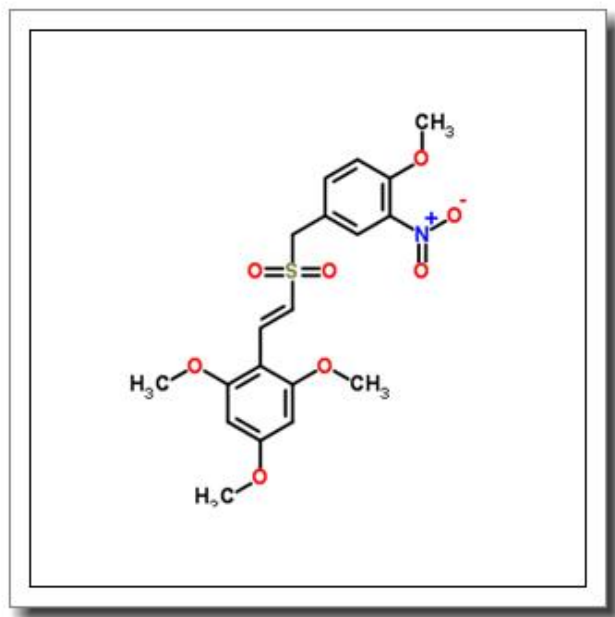


1,3,5-Trimethoxy-2-{(E)-2-[(4-methoxy-3-nitrobenzyl)sulfonyl]vinyl}benzene

1, 3, 5-Trimethoxy-2-{(E)-2-[(4-methoxy-3-nitrobenzyl)sulfonyl]vinyl}benzene



产品基本信息

属性	值
化学名称	1, 3, 5-Trimethoxy-2-{(E)-2-[(4-methoxy-3-nitrobenzyl)sulfonyl]vinyl}benzene
中文名称	1, 3, 5-Trimethoxy-2-{(E)-2-[(4-methoxy-3-nitrobenzyl)sulfonyl]vinyl}benzene
CAS 号	592542-52-4
分子式	C19H21NO8S
分子量	423. 437
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本产品为 1,3,5-Trimethoxy-2-[(E)-2-[(4-methoxy-3-nitrobenzyl)sulfonyl]vinyl]benzene, 化学式 C₁₉H₂₁N₀S₈, 分子量 423.437, CAS 号 592542-52-4。其结构包含甲氧基、硝基及乙烯基磺酰基团, 呈现淡黄色至类白色结晶粉末状, 纯度 ≥96%。该化合物具有显著的疏水性和光稳定性, 溶于常见有机溶剂 (如 DMSO、甲醇), 但在水中溶解度较低。其 E-构型乙烯基结构赋予其独特的空间位阻效应, 适用于特定生物偶联反应。

2. 生物化学功能与重要性

作为含磺酰基的芳香族衍生物, 该分子可通过磺酰基与巯基的特异性反应实现蛋白质或小分子的共价修饰。硝基的强吸电子特性使其成为光敏探针或药物载体的潜在构建单元, 而甲氧基的供电子效应可调节整体电子云分布, 在荧光标记或酶抑制剂设计中具有应用价值。

3. 主要应用领域与具体用途

该试剂主要用于以下领域:

- (1) 药物研发: 作为中间体用于合成靶向抗癌或抗炎化合物, 特别是酪氨酸激酶抑制剂类药物的结构优化;
- (2) 化学生物学: 通过磺酰基-巯基点击化学反应标记细胞膜蛋白或抗体, 用于活细胞成像研究;
- (3) 材料科学: 作为光响应性单体参与功能高分子材料的制备, 如光控释放载体。

4. 储存条件与使用建议

建议避光密封保存于 -20℃ 干燥环境中, 有效期 24 个月。使用时需在惰性气体 (如氮气) 保护下操作, 避免反复冻融。溶解推荐使用预冷的无水 DMSO (浓度 ≤10 mM), 工作液建议现配现用。与含游离巯基的化合物反应时, 需控制 pH 在 7.0-8.5 以获得最佳偶联效率。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 归一化法检测纯度 $\geq 96\%$ ，MS 及 ^1H NMR 验证结构。安全数据表明其具有刺激性，操作时需佩戴护目镜及防渗透手套，避免吸入粉尘。若接触皮肤，立即用大量清水冲洗 15 分钟并就医。废弃物应作为有害化学品处置，遵守当地环保法规。