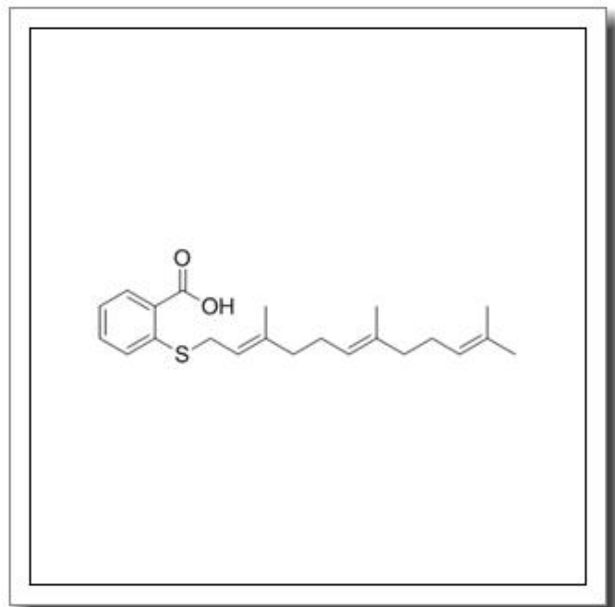


2-[[(2E,6E)-3,7,11-三甲基-2,6,10-十二烷三烯-1-基]硫代]苯甲酸

2-[(2E, 6E)-3, 7, 11-trimethyldodeca-2, 6, 10-trienyl]sulfanylbenzoic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-[(2E, 6E)-3, 7, 11-trimethyldodeca-2, 6, 10-trienyl]sulfanylbenzoic acid
中文名称	2-[[(2E, 6E)-3, 7, 11-三甲基-2, 6, 10-十二烷三烯-1-基]硫代]苯甲酸
CAS 号	162520-00-5
分子式	C ₂₂ H ₃₀ O ₂ S
分子量	358. 537
纯度	≥96%

产品说明

2-[(2E, 6E)-3, 7, 11-trimethyldodeca-2, 6, 10-trienyl]sulfanylbenzoic acid 产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品是一种含硫萜类衍生物，化学名称为 2-[[(2E, 6E)-3, 7, 11-三甲基-2, 6, 10-十二烷三烯-1-基]硫代]苯甲酸，CAS 号为 162520-00-5。其分子式为 C₂₂H₃₀O₂S，分子量 358.537，纯度 ≥96%。该化合物由法尼基硫醇与苯甲酸通过硫醚键结合而成，具有特征性黄色至淡棕色结晶或粉末形态，需避光保存。其结构中包含共轭双键体系及羧酸官能团，赋予其独特的化学活性和脂溶性。

2. 生物化学功能与重要性

该分子通过硫醚键将法尼基链与苯甲酸偶联，可模拟天然蛋白质法尼基化修饰的中间体结构。在生物体内，法尼基转移酶抑制剂的研究中具有重要价值，能干扰 Ras 蛋白等小 G 蛋白的膜定位过程，从而影响细胞信号传导通路。其结构中的硫原子可作为亲核试剂参与进一步衍生化反应，拓展其在药物化学中的应用。

3. 主要应用领域与具体用途

作为关键中间体，本品主要用于以下领域：

- 3.1 抗癌药物研发：靶向法尼基转移酶的抑制剂合成，用于 Ras 突变型肿瘤治疗研究。
- 3.2 化学生物学工具：用于蛋白质翻译后修饰机制研究，特别是膜相关蛋白的定位调控。
- 3.3 有机合成：作为构建含硫萜类化合物的砌块，适用于复杂天然产物的全合成。

4. 储存条件与使用建议

- 4.1 储存条件：建议密封保存于-20℃惰性气体（如氩气）环境中，避免反复冻融。
- 4.2 溶解性：易溶于 DMSO、甲醇等有机溶剂，水溶性差，配制时需预溶解于助溶

剂。

4.3 稳定性：对光敏感，操作需在避光条件下进行；溶液状态建议现配现用。

5. 质量控制与安全信息

5.1 质量控制：通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，质谱与核磁共振确认结构一致性。

5.2 安全警示：本品可能引起眼睛和皮肤刺激，操作时应佩戴防护手套及护目镜。

5.3 废弃物处理：需按危险化学品规范处置，不可直接排入下水道。

本产品仅供科研用途，不适用于临床或食品领域。具体实验方案建议结合最新文献数据优化。