

产品说明

2',6'-Dimethyl-4'-[3-(methylsulfonyl)propoxy]-3-biphenylcarbaldehyde
产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 2',6'-二甲基-4'-[3-(甲磺酰基)丙氧基]-3-联苯甲醛，CAS 号为 1000413-84-2，分子式 C₁₉H₂₂O₄S，分子量 346.441。其结构中包含联苯骨架、甲磺酰基丙氧基侧链及醛基官能团，赋予其独特的极性和反应活性。纯度 ≥96% (HPLC)，可通过核磁共振 (NMR) 和质谱 (MS) 进行结构确证。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为关键中间体，其醛基可参与缩合、还原胺化等反应，甲磺酰基则增强其水溶性与生物膜穿透能力。在药物化学中常用于构建激酶抑制剂或 G 蛋白偶联受体 (GPCR) 调节剂的分子骨架，对开发抗炎、抗肿瘤靶向药物具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发领域：

- 作为合成 VEGFR-2 (血管内皮生长因子受体 2) 抑制剂的中间体
- 用于构建含联苯结构的蛋白酶体抑制剂
- 在有机发光材料 (OLED) 中作为电子传输层前体

实验室研究中需严格控制反应条件，避免醛基在强碱性环境中发生坎尼扎罗反应。

4. 储存条件与使用建议

储存于 -20℃、避光、干燥的惰性气体 (如氩气) 环境中，开封后需充氮密封。使用前建议室温平衡 30 分钟以避免吸湿。溶解性测试表明，其在 DMSO 中溶解度 >50 mg/mL，甲醇中约 10 mg/mL。建议佩戴防尘口罩、丁腈手套及护目镜操作。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC 检测纯度，残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。急性毒性数据 (LD₅₀ 大鼠口服) >2000 mg/kg，属于低毒类物质，但可能引起眼睛和皮肤刺激。废弃物处理需

遵守当地法规，不可直接排入下水道。MSDS 备索，紧急情况请用大量清水冲洗接触部位并就医。

（注：本说明基于现有研究数据，实际应用前请进行充分验证。）