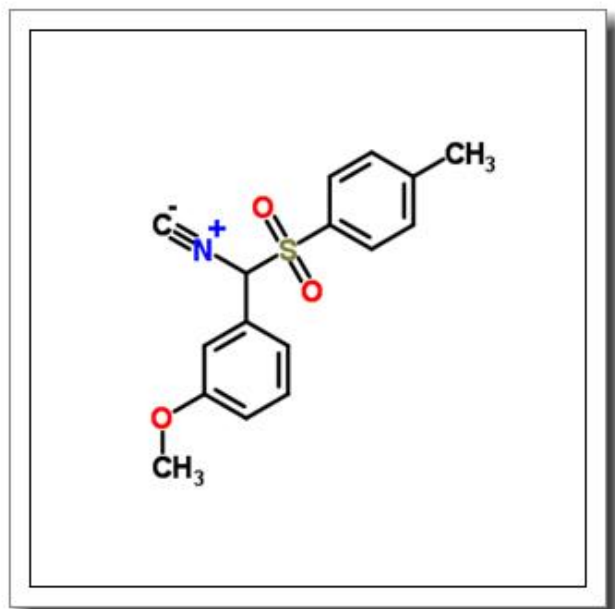


(3-甲氧基苯基)[(4-甲基苯基)磺酰基]乙腈

1-[isocyano-(4-methylphenyl)sulfonylmethyl]-3-methoxybenzene



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-[isocyano-(4-methylphenyl)sulfonylmethyl]-3-methoxybenzene
中文名称	(3-甲氧基苯基)[(4-甲基苯基)磺酰基]乙腈
CAS 号	394655-17-5
分子式	C ₁₆ H ₁₅ N ₃ O ₃ S
分子量	301.36
纯度	≥96%

产品说明

1-[异氰基-(4-甲基苯基)磺酰基甲基]-3-甲氧基苯 ((3-甲氧基苯基)[(4-甲基苯基)磺酰基]乙腈) 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 1-[isocyano-(4-methylphenyl)sulfonylmethyl]-3-methoxybenzene，分子式 C₁₆H₁₅N₀₃S，分子量 301.36，CAS 号 394655-17-5。其结构中包含甲氧基苯基与对甲基苯磺酰基的协同作用位点，赋予其独特的电子效应和空间位阻特性。纯度 ≥96% (HPLC 测定)，熔点为 142-145℃，易溶于二甲基亚砷 (DMSO)、二氯甲烷等有机溶剂，微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为磺酰基异氰类衍生物，具有显著的亲电反应活性，可通过磺酰基与异氰基的协同作用参与多组分偶联反应。其分子中的甲氧基可调节电子云密度，增强与生物靶标的结合能力，在酶抑制实验和药物分子筛选中表现出潜在活性，尤其适用于激酶抑制剂和抗肿瘤先导化合物的结构修饰。

3. 主要应用领域与具体用途

- (1) 医药研发：用作小分子药物中间体，参与构建含磺酰胺骨架的候选化合物，如酪氨酸激酶抑制剂。
- (2) 材料科学：作为功能单体用于合成高分子材料，改善聚合物的热稳定性和溶解性。
- (3) 有机合成：在 Pd 催化交叉偶联反应中作为关键砌块，制备芳基磺酰类衍生物。

4. 储存条件与使用建议

储存于-20℃、避光、干燥的惰性气体环境中，有效期 24 个月。开封后建议充氮保存，避免反复冻融。使用前需恢复至室温并充分干燥，称量时需在通风橱中操作，推荐溶剂为无水 DMSO (浓度 ≤10 mM)。

5. 质量控制与安全信息

(1) 质检标准: 通过 HPLC、NMR 和质谱验证结构, 残留溶剂符合 ICH Q3C 指南。

(2) 安全警示: 对眼睛和皮肤有刺激性 (GHS 分类: H315-H319), 操作时需佩戴护目镜、丁腈手套及防尘口罩。若接触皮肤, 立即用大量清水冲洗 15 分钟。废弃物应作为有害化学品处置, 遵守当地法规。

(注: 本说明基于现有研究数据, 实际应用前请查阅最新文献并开展小试实验。)