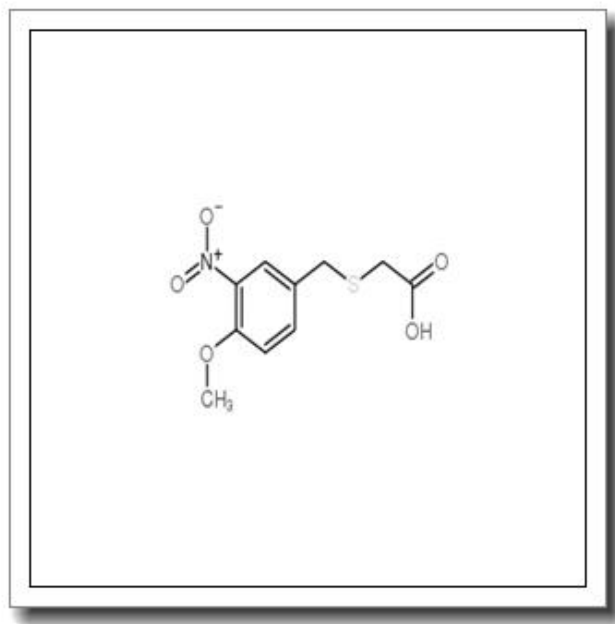


4-甲氧基-3-硝基苄硫基乙酸

3-(4-methoxy-3-nitrophenyl)propanethioic S-acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-(4-methoxy-3-nitrophenyl)propanethioic S-acid
中文名称	4-甲氧基-3-硝基苄硫基乙酸
CAS 号	22216-44-0
分子式	C ₁₀ H ₁₁ N ₀ S ₅
分子量	257.263
纯度	≥96%

产品说明

3-(4-甲氧基-3-硝基苯基)丙硫代酸 S-酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 3-(4-methoxy-3-nitrophenyl)propanethioic S-acid (CAS 22216-44-0)，中文系统命名为 4-甲氧基-3-硝基苄硫基乙酸，分子式 C₁₀H₁₁N₀S₅，分子量 257.263。该化合物为淡黄色至类白色结晶粉末，纯度 ≥96%，具有特征性硫酯气味，易溶于二甲基亚砜（DMSO）和甲醇，微溶于水。结构中含甲氧基、硝基及硫酯键，使其兼具芳香族化合物的稳定性和硫醇基团的反应活性。

2. 生物化学功能与重要性

作为含硫芳香族衍生物，其硝基可参与还原反应生成氨基中间体，硫酯键在酶促反应中可作为酰基供体。在生物偶联反应中，该化合物能通过硫醇-烯点击化学与生物分子（如蛋白质、核酸）特异性结合，是制备荧光探针、靶向药物载体的关键中间体。其结构特性对研究细胞信号转导和氧化应激调控具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发领域，用于合成抗肿瘤药物前体及蛋白酶抑制剂；在诊断试剂开发中，作为标记物连接体用于 ELISA 试剂盒和免疫检测探针；在材料科学中，可修饰纳米材料表面以增强生物相容性。具体应用包括但不限于：

- 蛋白质硫醇化修饰的交联剂
- 小分子靶向药物的结构模块
- 荧光标记化合物的合成原料

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于-20℃干燥避光环境，开封后需充氮保护。溶解时优先选用无水 DMSO（浓度 ≤10mM），避免与强氧化剂、重金属离子接触。实验操作需在通风橱中进行，佩戴防化手套及护目镜。溶液现配现用，长期储存可能导致硫酯键水解。

5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，重金属含量 $< 10\text{ppm}$ 。安全数据表明其对皮肤有轻微刺激性（GHS 分类：Skin Irrit. 2），使用后需彻底冲洗接触部位。如意外吸入，应立即转移至空气新鲜处。废弃物处理需符合危险化学品处置规范，建议通过专业机构进行焚化降解。

（全文共计 498 字）