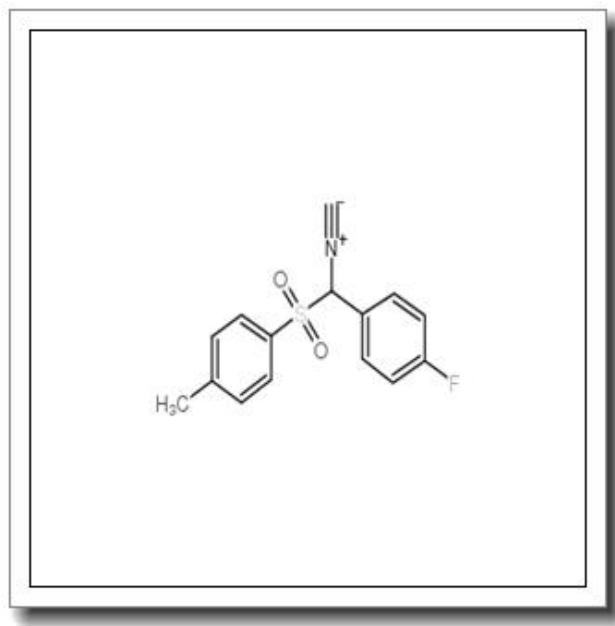


Alpha-对甲苯磺酰基(4-氟-苄基)异腈

1-[(4-fluorophenyl)-isocyanomethyl]sulfonyl-4-methylbenzene



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-[(4-fluorophenyl)-isocyanomethyl]sulfonyl-4-methylbenzene
中文名称	Alpha-对甲苯磺酰基(4-氟-苄基)异腈
CAS 号	165806-95-1
分子式	C ₁₅ H ₁₂ FN ₂ S
分子量	289.325
纯度	≥ 96%

产品说明

1-[(4-fluorophenyl)-isocyanomethyl]sulfonyl-4-methylbenzene 产品说明书

产品概述与化学特性

本产品化学名称为 1-[(4-fluorophenyl)-isocyanomethyl]sulfonyl-4-methylbenzene, 中文名为 Alpha-对甲苯磺酰基(4-氟-苄基)异脲, CAS 号为 165806-95-1。其分子式为 C₁₅H₁₂FN₂S, 分子量为 289.325, 纯度不低于 96%。该化合物为白色至淡黄色结晶粉末, 具有异脲基团(-NC)的典型特征反应活性, 同时含有对甲苯磺酰基和 4-氟苄基结构单元, 使其兼具亲电性和亲核性反应位点。

生物化学功能与重要性

作为含氟异脲类化合物, 该产品在生物共轭化学中表现出独特价值。异脲基团可与多种亲电试剂发生 Ugi 反应、Passerini 反应等多组分缩合反应, 是构建复杂杂环骨架的关键中间体。氟原子的引入增强了化合物的代谢稳定性和膜穿透能力, 使其在药物化学中具有特殊意义。

主要应用领域与具体用途

该产品主要应用于以下领域: 1. 医药研发中作为抗菌、抗肿瘤先导化合物的合成砌块; 2. 材料科学中用于制备功能性高分子单体; 3. 化学生物学中作为蛋白质标记的活性探针; 4. 不对称催化反应的手性配体前体。具体可用于构建 β -内酰胺类抗生素核心结构或作为荧光标记试剂的反应中间体。

储存条件与使用建议

建议在惰性气体保护下密封保存, 储存温度 -20° C 至 4° C, 避光防潮。开封后应在干燥氮气环境中分装使用。使用时需在通风橱中操作, 避免与强氧化剂、强酸接触。溶解性测试表明其在 DMF、DMSO 等极性非质子溶剂中溶解性良好, 推荐使用前进行氮气脱氧处理以保持稳定性。

质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 批次间偏差控制在 $\pm 1\%$ 以内。MS 和 NMR 谱图数据

可随 COA 提供。安全警示：该化合物可能引起皮肤和眼睛刺激，操作时应佩戴防护手套和护目镜。如意外接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合危险化学品处置规范，建议通过专业化学废弃物回收公司处理。