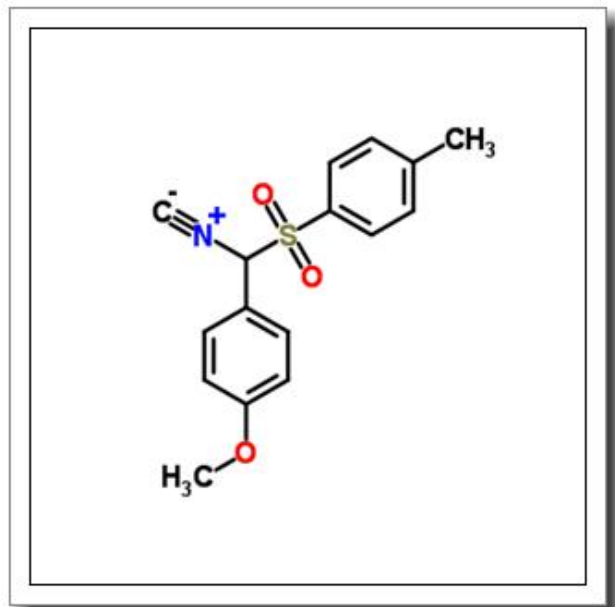


# Alpha-对甲苯磺酰基(4-甲氧基-苄基)异腈

*1-[isocyano-(4-methoxyphenyl)methyl]sulfonyl-4-methylbenzene*



## 产品基本信息

| 属性    | 值   |
|-------|---|
| 化学名称  | 1-[isocyano-(4-methoxyphenyl)methyl]sulfonyl-4-methylbenzene    |
| 中文名称  | Alpha-对甲苯磺酰基(4-甲氧基-苄基)异腈  |
| CAS 号 | 263389-54-4   |
| 分子式   | C <sub>16</sub> H <sub>15</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub> S |
| 分子量   | 301.36  |
| 纯度    | ≥96%  |

## 产品说明

### 1-[异氰基-(4-甲氧基苯基)甲基]磺酰基-4-甲基苯产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 1-[isocyano-(4-methoxyphenyl)methyl]sulfonyl-4-methylbenzene, 中文命名为 Alpha-对甲苯磺酰基(4-甲氧基-苄基)异脲, CAS 号为 263389-54-4。其分子式为 C<sub>16</sub>H<sub>15</sub>N<sub>03</sub>S, 分子量为 301.36, 纯度 ≥96%。该化合物为白色至类白色结晶粉末, 具有异脲基 (-NC) 和磺酰基 (-SO<sub>2</sub>-) 特征官能团, 在有机溶剂如二氯甲烷、甲醇中溶解性良好, 但对湿度敏感, 需避光保存。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为含异脲基的磺酰类衍生物, 该化合物在有机合成中表现出高反应活性, 尤其适用于过渡金属催化的偶联反应及多组分缩合反应。其分子中的甲氧基苯基结构可增强电子效应, 在构建杂环化合物或药物中间体时具有重要价值。此外, 异脲基的独特配位能力使其在催化领域和材料科学中有潜在应用。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药研发和精细化工领域。在药物化学中, 可作为抗生素或抗肿瘤活性分子的合成砌块; 在材料科学中, 用于制备功能性聚合物或配位框架材料。具体用途包括但不限于: Ugi 反应、Passerini 反应等多组分反应的底物, 以及金属有机框架 (MOFs) 的修饰配体。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议储存于 -20° C 至 4° C 的干燥环境中, 密封避光保存, 避免与湿气或强氧化剂接触。使用前需恢复至室温并确保环境干燥。操作时需在通风橱中进行, 佩戴防护手套和护目镜。溶解推荐使用无水级溶剂, 并建议现配现用以避免水解。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度 ≥96%, MS 和 NMR 验证结构。安全数据表明, 其可能对皮肤和眼睛有刺激性, CAS 号 263389-54-4 对应的 GHS 分类为 H315-H319-H335。若

不慎接触，需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地化学品管理法规。

注：以上信息基于现有研究数据，具体应用需进一步实验验证。