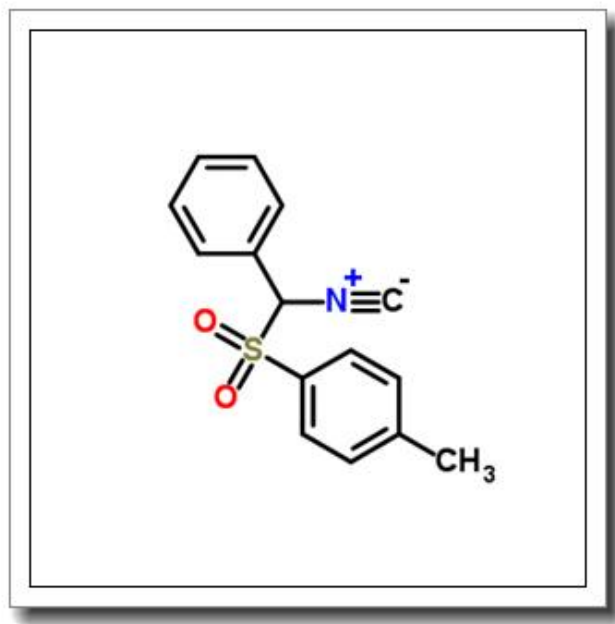


Alpha-对甲苯磺酰基苄基异腈

1-[isocyano(phenyl)methyl]sulfonyl-4-methylbenzene



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-[isocyano(phenyl)methyl]sulfonyl-4-methylbenzene
中文名称	Alpha-对甲苯磺酰基苄基异腈
CAS 号	36635-66-2
分子式	C ₁₅ H ₁₃ N ₂ O ₂ S
分子量	271.334
纯度	≥ 96%

产品说明

1-[异氰基(苯基)甲基]磺酰基-4-甲基苯 (Alpha-对甲苯磺酰基苄基异脲) 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(phenyl)methyl]sulfonyl-4-methylbenzene, 中文系统命名为 Alpha-对甲苯磺酰基苄基异脲, CAS 号为 36635-66-2。其分子式为 C₁₅H₁₃N₂O₂S, 分子量 271.334, 外观通常为白色至类白色结晶或粉末, 纯度 ≥96%。该化合物结构中含有磺酰基与异脲基团, 兼具亲电性与亲核性, 在有机合成中表现出独特的反应活性。

2. 生物化学功能与重要性

作为异脲类化合物的衍生物, 本产品可在 Ugi 反应、Passerini 反应等多组分缩合反应中可作为关键中间体, 用于构建复杂杂环骨架。其磺酰基团可增强分子极性, 提升产物溶解性, 同时异脲基团的高反应性使其成为肽类模拟物及药物先导化合物合成的理想选择。在生物共轭化学中, 可用于蛋白质标记或小分子探针的制备。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发、有机合成及材料科学领域。具体用途包括:

- 抗肿瘤药物及抗生素中间体的合成
- 金属有机框架 (MOFs) 材料的配体修饰
- 荧光标记试剂的制备
- 不对称催化反应中的手性辅助剂

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 -20℃ 至 4℃ 干燥环境中, 避免光照及潮湿。开封后需充惰性气体保护以延长稳定性。使用时需在通风橱中操作, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明, 本品易溶于二甲基亚砜 (DMSO)、二氯甲烷, 微溶于醇类溶剂。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 ≥96%, 批次间偏差控制在 ±1% 以内。安全数据表明, 其急

性毒性 (LD50) 为 420 mg/kg (大鼠经口), 属于有害物质。操作时应佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩, 若接触皮肤需立即用大量清水冲洗。废弃物处置需符合当地危险化学品管理法规。

注: 本说明基于现有实验数据编制, 具体应用需结合用户实验体系进行优化。更多技术参数可索取 COA 报告。