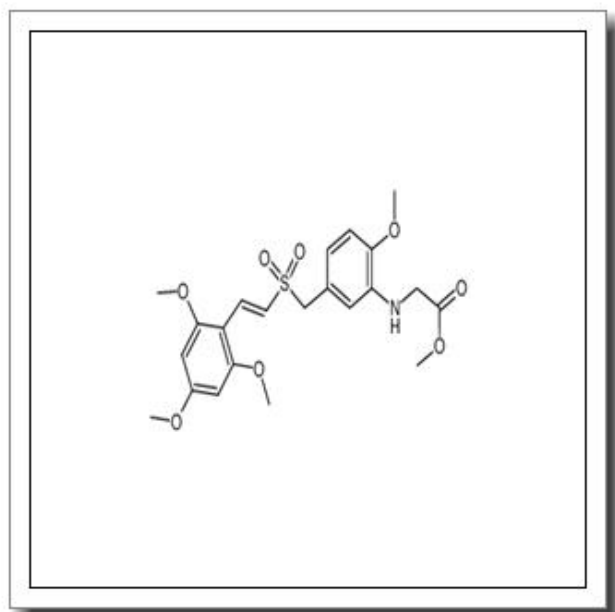


瑞格色替中间体

(E)-methyl 2-(2-methoxy-5-((2',4',6'-trimethoxystyrylsulfonyl)methyl)phenylamino)acetate



产品基本信息

属性	值
化学名称	(E)-methyl 2-(2-methoxy-5-((2',4',6'-trimethoxystyrylsulfonyl)methyl)phenylamino)acetate
中文名称	瑞格色替中间体
CAS 号	592542-61-5
分子式	C22H27N08S
分子量	465.517
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为瑞格色替中间体 ((E)-methyl 2-(2-methoxy-5-((2',4',6'-trimethoxystyrylsulfonyl)methyl)phenylamino)acetate)，化学式 C₂₂H₂₇N₀S₈，分子量 465.517，CAS 号 592542-61-5。外观通常为白色至类白色结晶或粉末，纯度 ≥96%。该化合物属于苯胺衍生物，结构中含有甲氧基、磺酰基和酯基等官能团，具有特定的立体构型（E 型烯烃），在有机溶剂如 DMSO、甲醇中溶解性良好，但水中溶解度较低。其化学稳定性需避光、防潮保存。

2. 生物化学功能与重要性

瑞格色替中间体是合成瑞格色替 (Regorafenib) 的关键原料。瑞格色替是一种多激酶抑制剂，通过靶向 VEGFR、PDGFR 等信号通路抑制肿瘤血管生成和增殖，临床用于治疗结直肠癌、胃肠道间质瘤等恶性肿瘤。本中间体的磺酰基和苯胺结构对最终药物的活性构效关系至关重要，其高纯度 (≥96%) 可确保下游合成反应的效率与产物质量。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于医药研发领域，具体包括：

- 作为瑞格色替原料药合成的核心中间体，用于实验室规模或工业化生产。
- 在激酶抑制剂类药物的结构-活性关系 (SAR) 研究中作为参照化合物。
- 可能用于其他磺酰类衍生物的修饰与开发，拓展抗肿瘤药物候选分子库。

4. 储存条件与使用建议

储存条件：需密封保存于 -20℃ 至 4℃ 的干燥环境中，避免光照与湿度。长期储存建议充氮保护以延缓氧化。

使用建议：实验前恢复至室温，称量时需在干燥环境下操作。建议使用惰性溶剂（如无水 DMSO）配制母液，避免反复冻融。操作人员应穿戴防护手套、护目镜及实验服，确保通风良好。

5. 质量控制与安全信息

质量控制：通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，并符合核磁共振（NMR）、质谱（MS）等结构确证标准。批次间提供 COA（质量分析证书），确保理化性质一致。

安全信息：本品对眼睛、皮肤有刺激性，可能引起炎症反应。若不慎接触，需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应作为有害化学品处理，遵守当地环保法规。运输时归类为非危险品，但需避免剧烈震动与高温。

（注：实际使用前请查阅最新版 MSDS 并严格遵循实验室安全规程。）