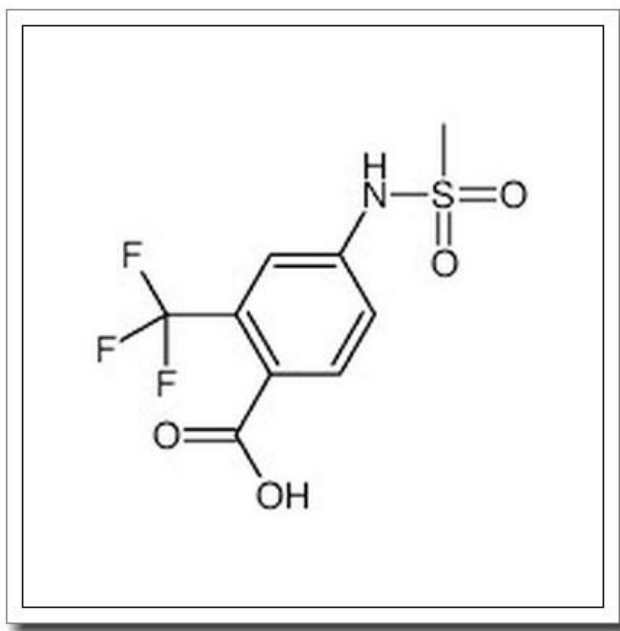


2-(二乙基氨基)乙基-4-(噻吩-2-甲酰氨基)苯甲酸酯

4-(methanesulfonamido)-2-(trifluoromethyl)benzoic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-(methanesulfonamido)-2-(trifluoromethyl)benzoic acid
中文名称	2-(二乙基氨基)乙基-4-(噻吩-2-甲酰氨基)苯甲酸酯
CAS 号	712305-93-6
分子式	C9H8F3NO4S
分子量	283.224
纯度	>96%

产品说明

4-(Methanesulfonamido)-2-(trifluoromethyl)benzoic acid 产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 4-(甲磺酰胺基)-2-(三氟甲基)苯甲酸, 中文别名 2-(二乙基氨基)乙基-4-(噻吩-2-甲酰氨基)苯甲酸酯, CAS 号为 712305-93-6。其分子式为 C₉H₈F₃N₀O₄S, 分子量 283.224, 是一种含三氟甲基及甲磺酰胺基的苯甲酸衍生物。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 纯度经 HPLC 验证 ≥96%, 具有高极性特征, 可溶于 DMSO、甲醇等有机溶剂, 微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为苯甲酸类化合物的修饰衍生物, 其分子中的三氟甲基可增强代谢稳定性, 甲磺酰胺基团则赋予其独特的电子效应和氢键结合能力。该结构特性使其在药物化学中可作为关键中间体, 用于设计靶向酶活性位点的小分子抑制剂, 尤其在抗炎、抗肿瘤药物研发中具有潜在应用价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于以下领域:

- 医药研发: 作为激酶抑制剂或 GPCR 调节剂的合成砌块, 用于先导化合物优化
- 材料科学: 用于制备含氟功能材料, 改善材料表面性能
- 生化研究: 作为探针分子研究蛋白质-配体相互作用机制

典型使用浓度为 1-10 mM (需根据实验体系优化), 建议通过质谱或核磁确认衍生化产物结构。

4. 储存条件与使用建议

长期储存需置于 -20°C、避光、干燥环境中, 有效期 24 个月。开封后建议分装使用, 避免反复冻融。使用时需在通风橱中操作, 佩戴防护手套及护目镜。溶解性测试表明, 推荐先用 DMSO 配制母液 (100 mg/mL), 再用缓冲液稀释至工作浓度。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 LC-MS 验证纯度, 批次间变异系数 <2%。MSDS 数据显示其具有刺激性,

避免吸入粉尘或接触皮肤。如意外接触，立即用大量清水冲洗 15 分钟并就医。废弃物处理需符合当地危险化学品管理条例。运输分类为非危险品，但建议使用防震包装。

注：具体实验方案请结合文献方法优化，本说明数据基于实验室环境测试结果。