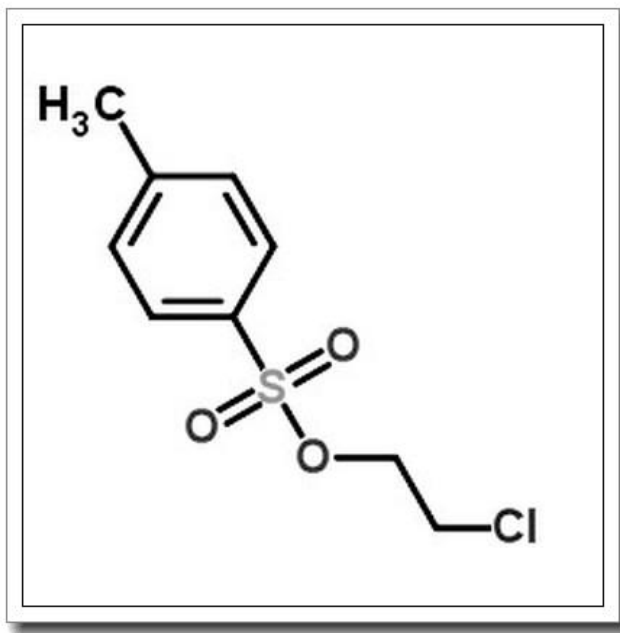


2-氯乙基对甲苯磺酸酯

2-Chloroethyl 4-methylbenzenesulfonate



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-Chloroethyl 4-methylbenzenesulfonate
中文名称	2-氯乙基对甲苯磺酸酯
CAS 号	80-41-1
分子式	C ₉ H ₁₁ ClO ₃ S
分子量	234.7
纯度	>96%

产品说明

2-氯乙基对甲苯磺酸酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

2-氯乙基对甲苯磺酸酯 (2-Chloroethyl 4-methylbenzenesulfonate) 是一种有机磺酸酯类化合物, CAS 号为 80-41-1, 分子式为 $C_9H_{11}ClO_3S$, 分子量为 234.7。本品为无色至淡黄色液体或结晶, 纯度大于 96%, 具有典型的磺酸酯类特征气味。其结构中包含氯乙基和甲苯磺酰基团, 赋予其良好的反应活性, 尤其在亲核取代反应中表现突出。该化合物易溶于有机溶剂如乙醇、丙酮和乙醚, 但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

作为烷基化试剂, 2-氯乙基对甲苯磺酸酯在生物化学领域主要用于引入氯乙基官能团, 参与 DNA 或蛋白质的修饰研究。其磺酸酯基团可作为良好的离去基团, 在温和条件下与亲核试剂 (如氨基、巯基) 发生反应, 因此在交联剂或功能化分子的合成中具有重要价值。此外, 该化合物在药物化学中常用于构建含氯乙基的前药或活性分子片段。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品广泛应用于有机合成、药物研发及材料科学领域。具体用途包括: 作为中间体用于抗肿瘤药物 (如氮芥类化合物) 的合成; 在聚合物改性中作为交联剂或引发剂组分; 在生化研究中用于蛋白质或核酸的烷基化标记。其高反应活性使其成为实验室小规模合成和工业化生产的优选试剂。

4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中, 避光保存于 2-8°C 干燥环境, 远离氧化剂和强碱。使用时需在通风橱中操作, 避免直接接触皮肤或吸入蒸气。建议佩戴防护手套、护目镜和实验服。开封后应充氮保护以延长保存期限。溶解时优先选择非质子溶剂 (如二甲基亚砜) 以保持稳定性。

5. 质量控制与安全信息

本品通过 HPLC 检测确保纯度 >96%，并严格控制水分和杂质含量。安全数据表明，该化合物具有刺激性，可能引起皮肤和眼睛损伤，吸入或食入有害。操作时应遵循 GHS 危险标识：H302（吞咽有害）、H315（皮肤刺激）、H319（严重眼刺激）。泄漏处理需用惰性吸附材料吸收，避免污染环境。废弃物应作为危险化学品处置，符合当地法规要求。