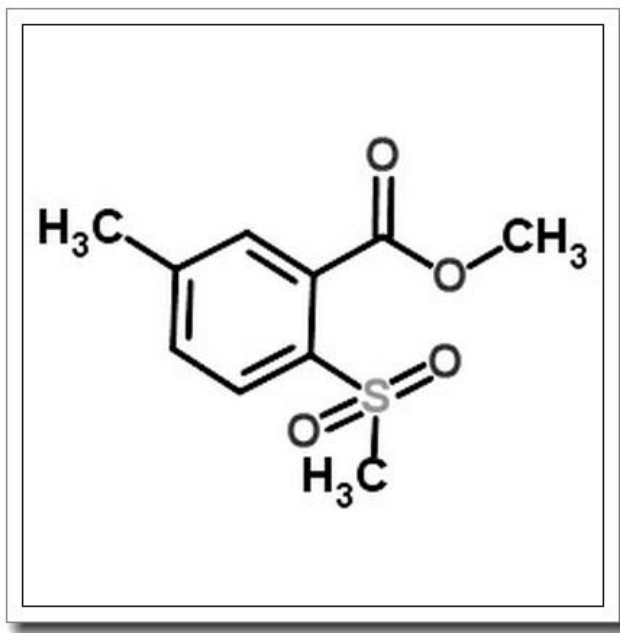


2-甲磺基-5-甲基苯甲酸甲酯

Methyl 5-methyl-2-(methylsulfonyl)benzoate



产品基本信息

| 属性 | 值 |
|-------|--------------------------------------------------|
| 化学名称 | Methyl 5-methyl-2-(methylsulfonyl)benzoate |
| 中文名称 | 2-甲磺基-5-甲基苯甲酸甲酯 |
| CAS 号 | 1368374-12-2 |
| 分子式 | C ₁₀ H ₁₂ O ₄ S |
| 分子量 | 228.265 |
| 纯度 | >96% |

产品说明

2-甲磺基-5-甲基苯甲酸甲酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

2-甲磺基-5-甲基苯甲酸甲酯 (Methyl 5-methyl-2-(methylsulfonyl)benzoate) 是一种有机硫化合物，化学式为 $C_{10}H_{12}O_4S$ ，分子量为 228.265。该化合物为白色至类白色结晶粉末，CAS 号为 1368374-12-2，纯度 $\geq 96\%$ 。其结构包含苯甲酸甲酯骨架，并在 2 位和 5 位分别引入甲磺基和甲基取代基，赋予其独特的化学稳定性和反应活性。

2. 生物化学功能与重要性

作为含硫芳香族衍生物，该化合物在有机合成中表现出显著的电子效应和空间位阻特性。甲磺基的强吸电子能力使其成为重要的中间体，可用于构建复杂分子骨架。在药物化学领域，此类结构常作为酶抑制剂或受体调节剂的关键药效团，尤其在抗炎和抗肿瘤先导化合物开发中具有潜在价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于以下领域：

- (1) 医药中间体：用于合成非甾体抗炎药、酪氨酸激酶抑制剂等活性分子。
- (2) 材料科学：作为液晶材料或高分子聚合物的改性单体。
- (3) 农药研发：参与构建含硫杀虫剂或杀菌剂的分子结构。
- (4) 学术研究：用于有机合成方法学开发及反应机理研究。

4. 储存条件与使用建议

建议在干燥、避光条件下储存，温度控制在 $2-8^{\circ}C$ 。开封后需充惰性气体保护，避免吸湿和氧化。使用时应佩戴防护手套、护目镜，在通风橱中操作。溶解性测试表明，该化合物易溶于二甲基亚砷 (DMSO)、丙酮，微溶于甲醇，不溶于水。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，残留溶剂符合 ICH 标准。MSDS 数据显示其属于刺激性化学品，避免与皮肤、眼睛直接接触。如发生泄漏，需用惰性吸附材料处理。

废弃物处置应遵守当地危险化学品管理条例。运输分类为 UN3077，需贴注环境危害标识。

注：本说明基于现有实验数据编制，具体应用需结合用户工艺验证。产品规格可能因批次调整，请以随货质检报告为准。