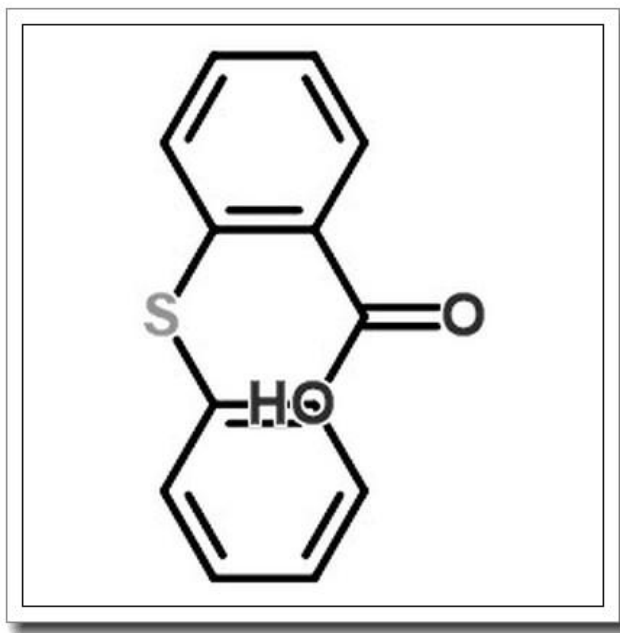


2-(苯基硫代)苯甲酸

2-(phenylthio)benzoic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-(phenylthio)benzoic acid
中文名称	2-(苯基硫代)苯甲酸
CAS 号	1527-12-4
分子式	C ₁₃ H ₁₀ O ₂ S
分子量	230.282
纯度	>96%

产品说明

2-(苯基硫代)苯甲酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

2-(苯基硫代)苯甲酸 (2-(phenylthio)benzoic acid) 是一种含硫芳香族羧酸衍生物，化学式为 $C_{13}H_{10}O_2S$ ，分子量 230.282，CAS 号为 1527-12-4。本品为白色至类白色结晶性粉末，纯度 >96%，可溶于有机溶剂如甲醇、乙醇和 DMSO，微溶于水。其结构中的苯硫基与羧基共同赋予分子独特的电子效应和反应活性，使其在有机合成和医药化学中具有重要价值。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物可作为有机合成中间体，其羧基易于衍生化为酯、酰胺等官能团，苯硫基则参与过渡金属催化偶联反应。在生物化学研究中，其结构类似物常用于酶抑制剂设计或药物分子结构修饰，尤其在抗炎和抗肿瘤活性分子开发中具有潜在应用。

3. 主要应用领域与具体用途

2-(苯基硫代)苯甲酸广泛应用于医药研发、材料科学和精细化工领域。具体用途包括：作为非甾体抗炎药 (NSAIDs) 衍生物的合成前体；用于制备液晶材料或光电功能分子中的硫醚键结构单元；在催化反应中作为配体或助剂。此外，其衍生物可能用于抗菌剂或抗氧化剂的开发。

4. 储存条件与使用建议

本品需密封保存于干燥、避光环境中，推荐储存温度为 2-8°C。长期存放建议充惰性气体保护。使用时应佩戴防护手套和护目镜，避免吸入粉尘或接触皮肤。溶解时优先选择极性有机溶剂，若需水相反应，建议先以少量 DMSO 助溶后再稀释。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，重金属含量符合 ACS 标准。安全数据表明，其急性毒性较低 (LD50 未明确)，但仍可能引起眼睛或皮肤刺激。操作时需在通风橱中进行，废弃物应按照国家有机硫化合物规范处置。如意外接触，立即用大量清水冲洗并就医。

注：本说明基于现有研究数据编制，具体应用需结合实验条件进一步验证。