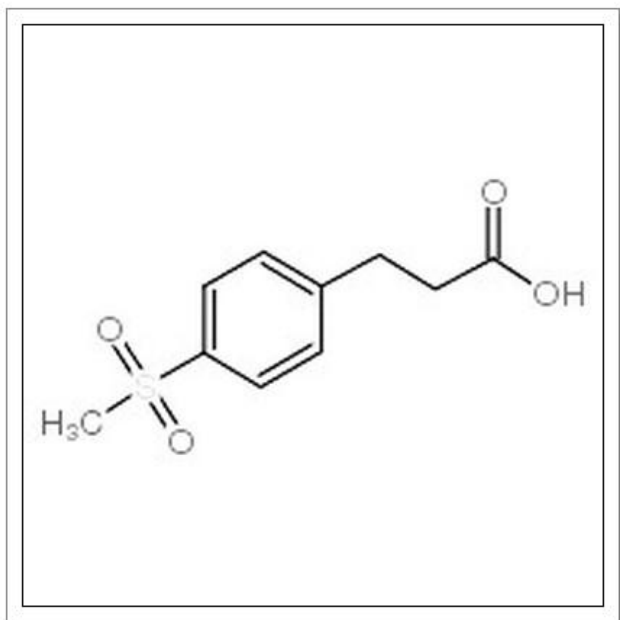


3-[4-(甲基磺酰基)苯基]丙酸

3-{4-(Methylsulfonyl)benzene}-1-propanoic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-{4-(Methylsulfonyl)benzene}-1-propanoic acid
中文名称	3-[4-(甲基磺酰基)苯基]丙酸
CAS 号	387350-46-1
分子式	C10H12O4S
分子量	228.265
纯度	>96%

产品说明

3-[4-(甲基磺酰基)苯基]丙酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3-[4-(甲基磺酰基)苯基]丙酸 (CAS 号 387350-46-1) 是一种有机磺酸衍生物, 分子式为 $C_{10}H_{12}O_4S$, 分子量 228.265。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 纯度 >96%, 具有苯环丙酸骨架与甲基磺酰基取代基, 表现出典型的羧酸与磺酰基的化学特性, 可溶于极性有机溶剂如 DMSO 和甲醇, 微溶于水。其结构中的活性官能团使其成为重要的合成中间体。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物可通过磺酰基与羧基参与多种生物分子相互作用, 在酶抑制或信号通路调控中具有潜在应用价值。其苯丙酸结构类似天然代谢物, 常作为药物设计中的关键药效团, 尤其在非甾体抗炎药 (NSAIDs) 类似物开发中受到关注。甲基磺酰基的引入可增强化合物的代谢稳定性和靶标结合能力。

3. 主要应用领域与具体用途

作为医药中间体, 广泛用于合成 COX-2 抑制剂等抗炎药物; 在化学生物学研究中, 可用作蛋白质修饰探针或小分子抑制剂的核心结构; 材料科学领域可用于制备功能化高分子单体。具体实验用途包括: 体外酶活性测定、分子对接研究、以及作为有机合成中羧酸保护/去保护的中间体。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 $-20^{\circ}C$ 干燥环境中, 避免光照与湿气。开封后需充惰性气体保护以延长稳定性。使用前需恢复至室温并短暂离心。工作溶液建议现配现用, 溶剂优先选择无水 DMSO。实验操作需在通风橱中进行, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。

5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC 检测纯度 >96%, 批号关联完整分析证书 (COA)。危险代码 H315-H319 (造成皮肤和眼刺激), 防护措施包括穿戴实验服、护目镜及丁腈手套。如意外接触, 立即用大量清水冲洗并就医。废弃物需按有机有害化学品规范处置。

(注: 本说明基于现有研究数据, 实际应用前请查阅最新文献并开展方法验证。)