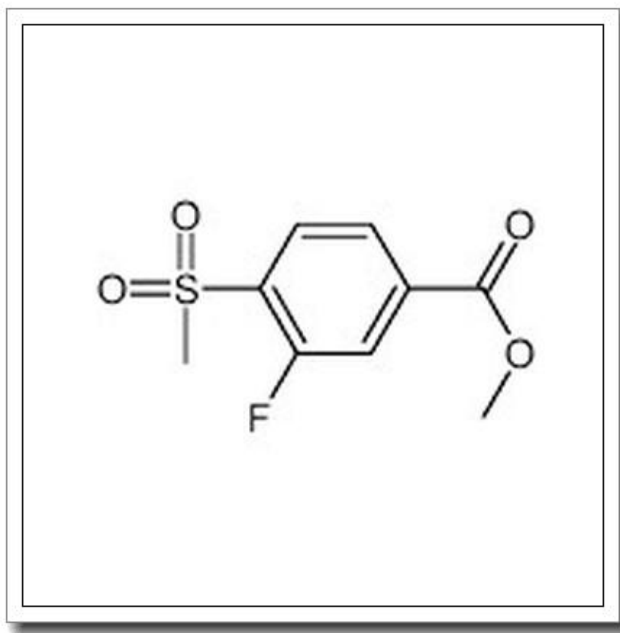


3-氟-4-甲磺基苯甲酸甲酯

Methyl 3-Fluoro-4-(methylsulfonyl)benzoate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Methyl 3-Fluoro-4-(methylsulfonyl)benzoate
中文名称	3-氟-4-甲磺基苯甲酸甲酯
CAS 号	1215074-49-9
分子式	C ₉ H ₉ F ₀ S
分子量	232.229
纯度	>96%

产品说明

3-氟-4-甲磺基苯甲酸甲酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3-氟-4-甲磺基苯甲酸甲酯 (Methyl 3-Fluoro-4-(methylsulfonyl)benzoate) 是一种含氟芳香族化合物，化学式为 C₉H₉F₀S₄，分子量为 232.229。该化合物以白色至类白色结晶或粉末形式存在，纯度高于 96%，CAS 号为 1215074-49-9。其结构中的氟原子和甲磺基团赋予其独特的电子效应和化学稳定性，使其在有机合成中表现出较高的反应活性。

2. 生物化学功能与重要性

作为含氟苯甲酸衍生物，该化合物在药物化学和材料科学中具有重要价值。氟原子的引入可增强分子的脂溶性和代谢稳定性，而甲磺基团则提供了潜在的氢键受体位点。这些特性使其成为设计酶抑制剂或受体调节剂的理想中间体，尤其在抗炎、抗肿瘤药物研发中备受关注。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药和农药中间体的合成。在医药领域，它是构建 EGFR 抑制剂、COX-2 抑制剂等靶向药物的重要前体。在农药化学中，可用于开发高效低毒的含氟杀虫剂或除草剂。此外，在材料科学中，可作为液晶材料或高分子聚合物的改性单体。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C 至 4° C 的干燥环境中避光保存，长期储存需充惰性气体保护。开封后应尽快使用，避免反复冻融。使用时需在通风橱中操作，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明，该化合物易溶于二甲基亚砷 (DMSO) 和丙酮，微溶于水。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度 ≥96%，批次间稳定性良好。安全数据表明，其急性毒性 (LD₅₀) 为 500 mg/kg (大鼠经口)，属于有害物质。操作时应佩戴防护手套、护

目镜和防尘口罩，若接触皮肤需立即用大量清水冲洗。废弃物处理需符合当地化学品管理法规，建议采用焚烧法降解。

（注：本说明基于现有实验数据编制，具体应用需结合用户实验条件优化。）