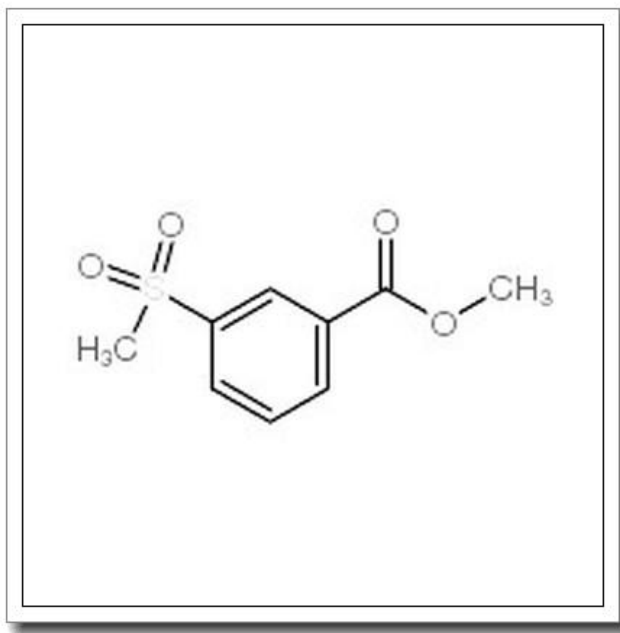


## 3-甲磺基苯甲酸甲酯

*methyl 3-methylsulfonylbenzoate*



### 产品基本信息

属性	值
化学名称	methyl 3-methylsulfonylbenzoate
中文名称	3-甲磺基苯甲酸甲酯
CAS 号	22821-69-8
分子式	C <sub>9</sub> H <sub>10</sub> O <sub>4</sub> S
分子量	214.238
纯度	>96%

## 产品说明

### 3-甲磺基苯甲酸甲酯产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

3-甲磺基苯甲酸甲酯 (methyl 3-methylsulfonylbenzoate) 是一种有机硫化合物，化学式为 C<sub>9</sub>H<sub>10</sub>O<sub>4</sub>S，分子量为 214.238。该化合物为白色至类白色结晶或粉末，CAS 号为 22821-69-8，纯度通常高于 96%。其结构特征为苯甲酸甲酯的间位取代甲磺基团，赋予其独特的极性和反应活性。该物质易溶于有机溶剂如甲醇、乙醇和乙腈，微溶于水，熔点和沸点数据需参考具体实验测定值。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为甲磺基苯甲酸衍生物，该化合物在有机合成中常作为关键中间体，其甲磺基团可作为强吸电子基团参与亲核取代或偶联反应。在药物化学领域，甲磺基结构片段常见于抗菌、抗炎及抗肿瘤活性分子的设计中，例如作为磺胺类药物的结构类似物。此外，其酯基特性使其在酶抑制剂开发中具有潜在应用价值。

#### 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。在医药研发中，可用于构建含磺基的杂环化合物或非天然氨基酸衍生物；在农药领域，可作为除草剂或杀菌剂的前体物质。实验室中亦用于研究磺基在过渡金属催化反应（如 Suzuki 偶联）中的导向作用。具体实验方案需结合目标产物结构进行优化。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于干燥、阴凉处（2-8℃），避免光照与潮湿环境。开封后需充惰性气体保护以延长稳定性。使用时应佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩，操作环境需通风良好。溶解性测试推荐优先选用极性有机溶剂，反应投料前建议通过 TLC 或 HPLC 监测原料纯度。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 ≥96%，残留溶剂符合 ICH 标准。MSDS 数据显示其具有刺激性，接触皮肤或眼睛需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置应遵守当地化学

品管理法规，不可直接排入下水道。运输分类为普通化学品，但需避免与强氧化剂共存。

注：以上数据基于实验室环境测定，实际应用需根据具体工艺条件验证。更多技术参数可联系供应商获取 COA 报告。