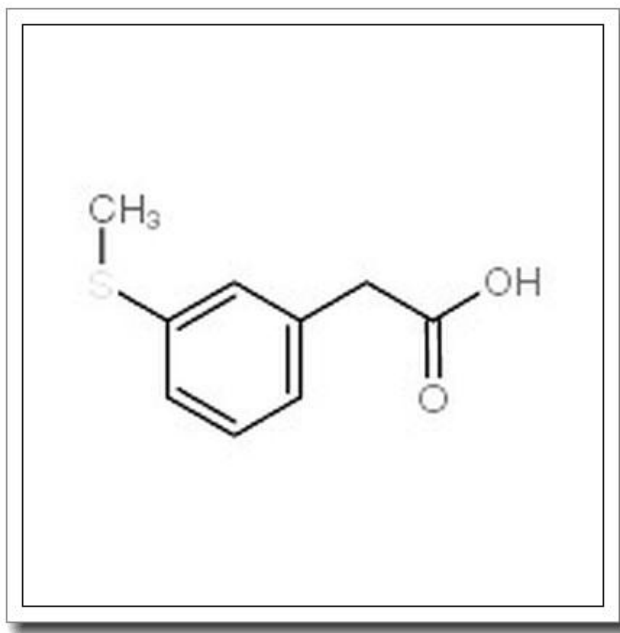


3-(硫代甲基)苯醋酸

2-(3-methylsulfanylphenyl)acetic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-(3-methylsulfanylphenyl)acetic acid
中文名称	3-(硫代甲基)苯醋酸
CAS 号	18698-73-2
分子式	C ₉ H ₁₀ O ₂ S
分子量	182.239
纯度	>96%

产品说明

2-(3-甲基硫代苯基)乙酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

2-(3-甲基硫代苯基)乙酸 (化学名称: 2-(3-methylsulfanylphenyl)acetic acid) 是一种含硫芳香族羧酸衍生物, 其分子式为 $C_9H_{10}O_2S$, 分子量为 182.239。该化合物以白色至类白色结晶粉末形式存在, 纯度 $\geq 96\%$, CAS 号为 18698-73-2。其结构中包含苯环、硫醚键及羧酸官能团, 赋予其独特的极性和反应活性, 易溶于有机溶剂如甲醇、乙醇, 微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为苯乙酸类化合物的硫代衍生物, 该物质在生物合成途径中可作为中间体参与含硫代谢物的制备。其硫醚键在酶催化反应中可能作为电子供体或受体, 而羧酸基团使其易于形成盐或酯类衍生物, 在药物化学和材料科学中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品广泛应用于医药研发、有机合成及材料科学领域。在医药领域, 它是合成非甾体抗炎药、抗菌剂及抗肿瘤化合物的关键中间体; 在农药化学中, 可用于制备含硫植物生长调节剂; 此外, 还可作为配体用于金属有机框架 (MOF) 材料的构建。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于干燥、避光环境中, 温度控制在 $2-8^{\circ}C$ 以延长稳定性。开封后需充惰性气体保护, 避免氧化。使用时应佩戴防护手套、护目镜, 在通风橱中操作, 避免吸入粉尘或接触皮肤。溶解时优先选用 DMF 或 DMSO 等极性溶剂。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 重金属含量 $< 10ppm$, 符合实验室级化学品标准。安全数据表明, 其急性毒性 (LD50) 为大鼠经口 $> 2000mg/kg$, 但可能对眼睛和呼吸道产生刺激性。废弃处理需遵循危险化学品管理条例, 不可直接排放至环境中。

注: 具体实验方案请结合文献方法优化, 本说明仅提供基础技术参考。