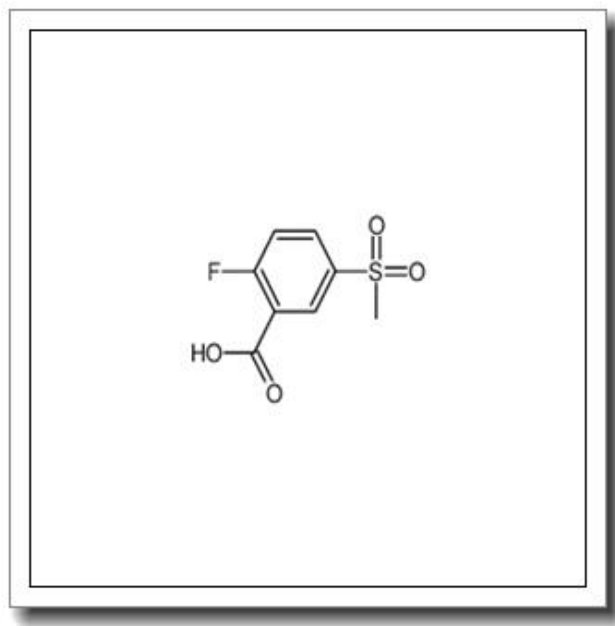


## 2-氟-5-甲烷磺酰基苯甲酸

*2-fluoro-5-methylsulfonylbenzoic acid*



### 产品基本信息

属性	值
化学名称	2-fluoro-5-methylsulfonylbenzoic acid
中文名称	2-氟-5-甲烷磺酰基苯甲酸
CAS 号	247569-56-8
分子式	C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> F <sub>0</sub> S
分子量	218.202
纯度	≥96%

## 产品说明

### 2-氟-5-甲磺酰基苯甲酸产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

2-氟-5-甲磺酰基苯甲酸 (2-fluoro-5-methylsulfonylbenzoic acid) 是一种有机芳香族化合物，化学式为  $C_8H_7F_0_4S$ ，分子量为 218.202。该化合物为白色至类白色结晶性粉末，CAS 号为 247569-56-8，纯度  $\geq 96\%$ 。其结构特征为苯甲酸骨架的 2 位被氟原子取代，5 位连接甲磺酰基团，赋予其独特的电子效应和化学反应性。该物质易溶于极性有机溶剂（如甲醇、二甲基亚砷），微溶于水，熔点在 180-185°C 范围内。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为含氟苯甲酸衍生物，该化合物兼具磺酰基的强吸电子特性与羧酸的配位能力，使其成为药物化学中重要的中间体。氟原子的引入可增强化合物的代谢稳定性及膜穿透性，而磺酰基团则常用于调节分子与靶蛋白的相互作用。这些特性使其在酶抑制剂设计和放射性标记前体合成中具有特殊价值。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于以下领域：

- (1) 医药研发：作为激酶抑制剂、G 蛋白偶联受体调节剂的关键合成砌块；
- (2) 农药化学：用于开发新型含氟磺酰类除草剂；
- (3) 材料科学：作为液晶材料的极性修饰单元；
- (4) 诊断试剂：参与荧光探针的羧基端功能化。典型反应包括酰胺缩合、亲核芳香取代及过渡金属催化偶联等。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议在干燥、避光条件下储存于 2-8°C 环境中，长期保存需充惰性气体保护。开封后应避免吸湿，建议分装使用。操作时需佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩，在通风橱中进行称量。溶解推荐使用预冷的无水乙醇或 DMF，避免与强氧化剂共存。

## 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 $< 10\text{ppm}$ ，符合 ISO 9001 质量控制标准。安全数据表明其急性毒性（LD50 大鼠经口） $> 500\text{mg/kg}$ ，但可能引起眼睛和皮肤刺激。意外接触时需立即用大量清水冲洗 15 分钟，并就医观察。废弃物处理应遵守当地危险化学品管理条例，建议通过专业机构进行焚化处置。

（注：本说明基于现有研究数据，实际应用前请查阅最新版物质安全数据表 MSDS 并开展小试验证。）