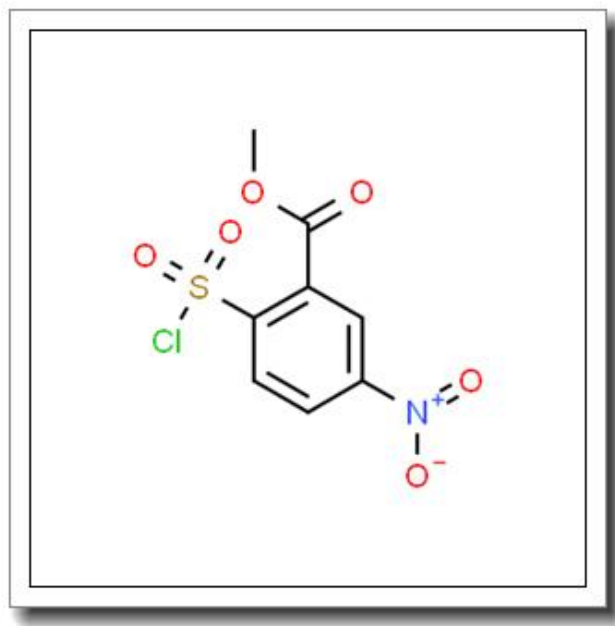


2-(氯磺酰基)-5-硝基苯甲酸甲酯

Methyl 2-(chlorosulfonyl)-5-nitrobenzoate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Methyl 2-(chlorosulfonyl)-5-nitrobenzoate
中文名称	2-(氯磺酰基)-5-硝基苯甲酸甲酯
CAS 号	1039020-81-9
分子式	C ₈ H ₆ ClN ₁ O ₆ S
分子量	279.65
纯度	≥96%

产品说明

2-(氯磺酰基)-5-硝基苯甲酸甲酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

2-(氯磺酰基)-5-硝基苯甲酸甲酯 (Methyl 2-(chlorosulfonyl)-5-nitrobenzoate) 是一种高纯度有机合成中间体，化学式为 $C_8H_6ClNO_6S$ ，分子量 279.65。该化合物为白色至淡黄色结晶粉末，CAS 号为 1039020-81-9，纯度 $\geq 96\%$ 。其结构同时包含氯磺酰基 ($-SO_2Cl$) 和硝基 ($-NO_2$) 等高活性官能团，赋予其优异的亲电反应特性，适用于多种亲核取代及缩合反应。

2. 生物化学功能与重要性

作为磺酰化试剂，该化合物可通过氯磺酰基与氨基或羟基的缩合反应生成磺酰胺或磺酸酯类衍生物，在药物化学中广泛用于构建活性分子骨架。硝基的存在进一步增强了其作为电子受体的能力，在荧光标记物或光敏材料合成中具有独特价值。其高反应选择性使其成为复杂分子修饰的关键中间体。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于以下领域：

- 医药研发：合成磺胺类抗生素或酪氨酸激酶抑制剂的前体化合物
- 材料科学：制备含硝基的光响应性高分子材料
- 分析化学：作为 HPLC 衍生化试剂用于检测伯胺类物质
- 农药中间体：参与合成具有杀虫活性的磺酰脲类化合物

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 至 $4^{\circ}C$ 的干燥环境中避光保存，开封后需充惰性气体保护。使用时应佩戴防化手套、护目镜及防毒面具，操作环境需配备通风设备。溶解性测试表明其易溶于二氯甲烷、DMF 等有机溶剂，水溶液中易水解，建议现配现用。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和 NMR 双重验证，杂质含量严格控制在 4% 以下。安全数据表明其具有刺激性 (GHS 分类: Skin Irrit. 2)，避免与皮肤直接接触。如发生泄漏，

需用惰性吸附材料处理并置于专用废液容器中。运输分类为 UN3261，需符合III类危险化学品运输规范。

注：具体实验方案请参阅最新文献或咨询我司技术部门获取定制化应用指导。