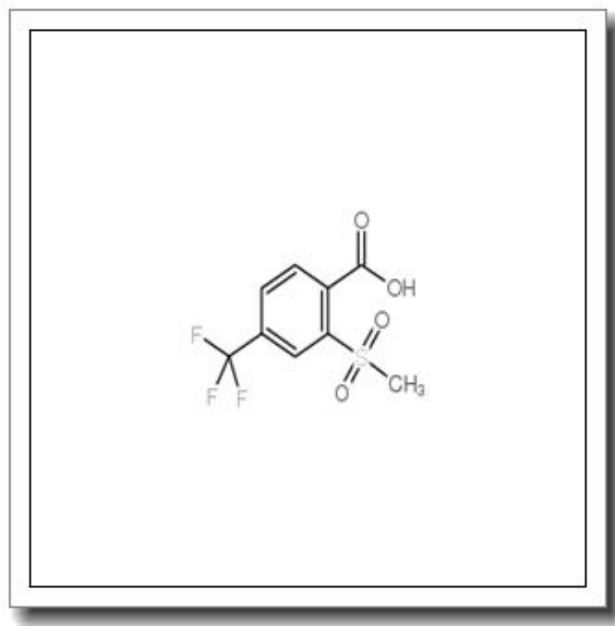


2-甲基磺酰基-4-三氟甲基苯甲酸

2-(Methylsulfonyl)-4-(trifluoromethyl)benzoic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-(Methylsulfonyl)-4-(trifluoromethyl)benzoic acid
中文名称	2-甲基磺酰基-4-三氟甲基苯甲酸
CAS 号	142994-06-7
分子式	C ₉ H ₇ F ₃ O ₄ S
分子量	268.21
纯度	≥96%

产品说明

2-(Methylsulfonyl)-4-(trifluoromethyl)benzoic acid 产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 2-(甲基磺酰基)-4-(三氟甲基)苯甲酸, CAS 号为 142994-06-7, 分子式为 C₉H₇F₃O₄S, 分子量 268.21。外观为白色至类白色结晶粉末, 纯度 ≥96%。其结构中的磺酰基与三氟甲基赋予分子强极性 & 稳定性, 苯甲酸骨架使其易于参与有机合成反应。该化合物在常温下稳定, 微溶于水, 易溶于甲醇、乙腈等有机溶剂。

2. 生物化学功能与重要性

作为含氟芳香族衍生物, 该分子兼具疏水性与电子效应, 能显著调节靶标分子的生物活性。三氟甲基的强吸电子特性可增强与蛋白质受体的结合能力, 磺酰基则可能参与氢键形成或酶抑制过程。这类结构在药物化学中常用于先导化合物优化, 尤其在抗炎、抗肿瘤及中枢神经系统药物研发中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于医药中间体合成, 特别是用于构建含三氟甲基的活性药物成分 (API)。具体用途包括: 1) 作为激酶抑制剂的关键片段; 2) 用于开发非甾体抗炎药的结构修饰; 3) 在农用化学品中作为高效杀虫剂的中间体。此外, 其衍生物可用于荧光标记探针或材料科学中的功能单体。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 -20°C 至 4°C 的干燥环境中, 避免光照与湿气。开封后需充惰性气体保护以防降解。使用时应佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩, 在通风橱中操作。溶解推荐使用无水 DMF 或 THF, 反应温度建议控制在 0-25°C 以避免副反应。

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 USP 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 15 分钟并就医。废弃物处理需遵守

危险化学品处置规范，不可直接排入下水道。运输分类为 UN2811，需贴注“有害固体”标签。

注：以上数据基于实验室测试结果，实际应用需根据具体工艺条件进行验证。