

4-Chlorosulfonyl-Benzoic Acid Ethyl Ester

4-Chlorosulfonyl-Benzoic Acid Ethyl Ester

产品图片未找到

产品基本信息

属性	值
化学名称	4-Chlorosulfonyl-Benzoic Acid Ethyl Ester
中文名称	4-Chlorosulfonyl-Benzoic Acid Ethyl Ester
CAS 号	10486-51-8
分子式	C ₉ H ₉ ClO ₄ S
分子量	248.683
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

4-Chlorosulfonyl-Benzoic Acid Ethyl Ester (4-氯磺酰基苯甲酸乙酯) 是一种有机磺酰氯衍生物, CAS 号为 10486-51-8, 分子式为 $C_9H_9ClO_4S$, 分子量为 248.683。该化合物为白色至类白色结晶或粉末, 纯度通常 $\geq 96\%$ 。其结构中的氯磺酰基 ($-SO_2Cl$) 具有高反应活性, 易与氨基、羟基等亲核基团发生取代反应, 而酯基 ($-COOEt$) 则赋予其一定的脂溶性。该化合物在常温下稳定, 但需避免潮湿环境以防止水解。

2. 生物化学功能与重要性

4-Chlorosulfonyl-Benzoic Acid Ethyl Ester 作为磺酰化试剂, 在生物化学领域常用于引入磺酰基团, 修饰蛋白质、多肽或其他含活性氢的分子。其磺酰氯基团可与生物分子中的氨基形成稳定的磺酰胺键, 广泛应用于探针标记、药物偶联和功能化材料合成。此外, 其酯基可通过水解或转酯化进一步衍生化, 扩展了其在有机合成中的应用范围。

3. 主要应用领域与具体用途

该化合物主要用于医药中间体、功能材料合成和生化研究领域。在药物研发中, 它是合成磺胺类化合物或靶向药物载体的重要砌块。在材料科学中, 可用于制备磺化聚合物或表面改性剂。实验室中常作为交联剂或标记试剂, 用于蛋白质修饰或荧光探针的合成。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $2-8^\circ C$ 、干燥惰性气体 (如氮气) 保护下密封储存, 避免与湿气、强碱或氧化剂接触。使用时需在通风橱中操作, 佩戴防护手套和护目镜。开封后应尽快使用, 剩余试剂需重新密封并充入惰性气体。溶解时可选用无水二氯甲烷或 DMF 等非质子性溶剂。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测确保纯度 $\geq 96\%$, 并提供核磁 (NMR) 和质谱 (MS) 数据以验

证结构。安全信息显示，该化合物对皮肤、眼睛和呼吸道有刺激性，可能引起灼伤。若不慎接触，需立即用大量清水冲洗并就医。废弃处理需遵循当地化学品管理法规，不可直接排入环境。运输时归类为腐蚀性物质，需贴附相应危险标识。