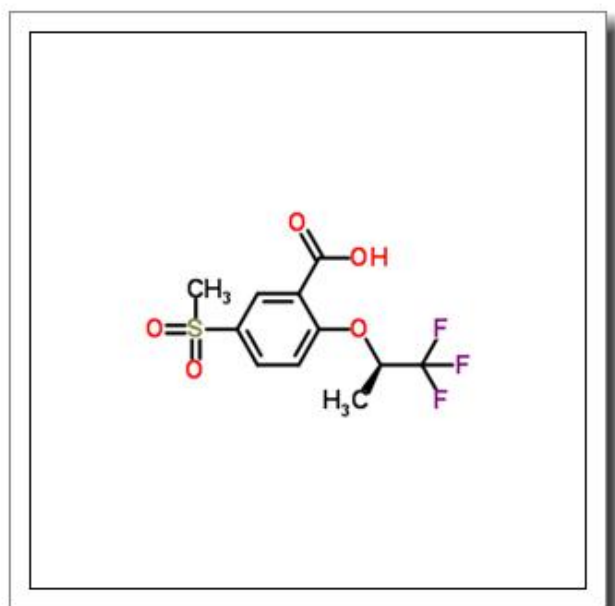


5-(Methylsulfonyl)-2-{[(2R)-1,1,1-trifluoro-2-propanyl]oxy}benzoic acid

5-(Methylsulfonyl)-2-{[(2R)-1,1,1-trifluoro-2-propanyl]oxy}benzoic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	5-(Methylsulfonyl)-2-{[(2R)-1,1,1-trifluoro-2-propanyl]oxy}benzoic acid
中文名称	5-(Methylsulfonyl)-2-{[(2R)-1,1,1-trifluoro-2-propanyl]oxy}benzoic acid
CAS 号	845616-83-3
分子式	C ₁₁ H ₁₁ F ₃ O ₅ S
分子量	312.262
纯度	≥96%

产品说明

5-(甲基磺酰基)-2-{[(2R)-1,1,1-三氟-2-丙基]氧基}苯甲酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 5-(甲基磺酰基)-2-{[(2R)-1,1,1-三氟-2-丙基]氧基}苯甲酸，CAS 号为 845616-83-3，分子式为 C₁₁H₁₁F₃O₅S，分子量为 312.262。该化合物是一种含磺酰基和三氟甲基的苯甲酸衍生物，具有手性中心（2R 构型），纯度 ≥96%。其结构中的磺酰基和羧基团赋予其显著的极性和反应活性，而三氟丙氧基则增强了化合物的脂溶性和代谢稳定性。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物在生物化学研究中常作为中间体或功能分子，其磺酰基可参与亲核取代反应，羧基团易于衍生化为酯、酰胺等衍生物。三氟甲基的引入能显著调节分子的电子效应和亲脂性，使其在药物化学中具有潜在应用价值，例如作为酶抑制剂或受体配体的结构模块。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品广泛应用于医药研发和有机合成领域，具体用途包括：

- 作为手性合成砌块，用于构建含三氟甲基的生物活性分子。
- 在药物发现中用于优化先导化合物的代谢稳定性和靶标结合能力。
- 作为荧光标记或探针分子的前体，利用其磺酰基的化学可修饰性。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C 下避光干燥储存，长期保存需充惰性气体保护。使用时需在干燥环境中操作，避免与强氧化剂或强碱接触。溶解性测试表明，该化合物易溶于二甲基亚砜（DMSO）和甲醇，水溶性较低，建议先用有机溶剂助溶后再配制水相体系。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 ≥96%，核磁共振（NMR）和质谱（MS）验证结构。安全数据表明，该化合物可能对眼睛和皮肤有刺激性，操作时应佩戴防护手套和护目镜。

若不慎接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地化学品管理法规。

（注：实际使用前请查阅最新版材料安全数据表（MSDS）并严格遵循实验室安全规程。）