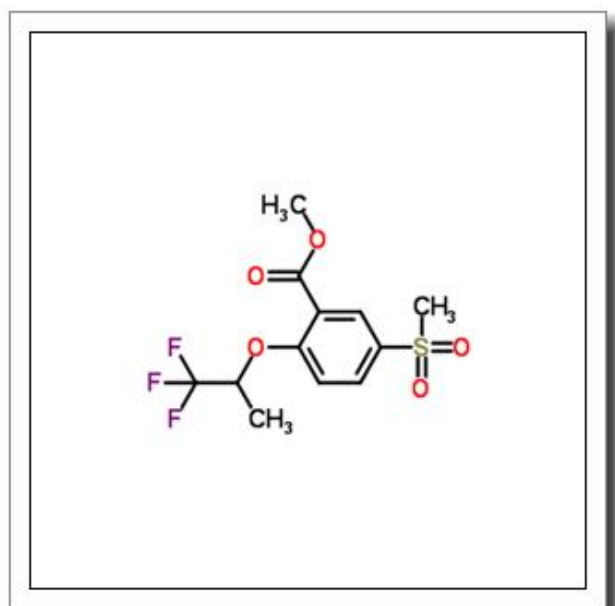


Methyl 5-(methylsulfonyl)-2-[(1,1,1-trifluoro-2-propanyl)oxy]benzoate

Methyl 5-(methylsulfonyl)-2-[(1,1,1-trifluoro-2-propanyl)oxy]benzoate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Methyl 5-(methylsulfonyl)-2-[(1,1,1-trifluoro-2-propanyl)oxy]benzoate
中文名称	Methyl 5-(methylsulfonyl)-2-[(1,1,1-trifluoro-2-propanyl)oxy]benzoate
CAS 号	845617-19-8
分子式	C ₁₂ H ₁₃ F ₃ O ₅ S
分子量	326.289
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为白色至类白色结晶粉末，化学名称为 Methyl 5-(methylsulfonyl)-2-[(1,1,1-trifluoro-2-propanyl)oxy]benzoate，CAS 号为 845617-19-8，分子式为 C₁₂H₁₃F₃O₅S，分子量为 326.289。其纯度 ≥96%，具有稳定的化学性质，可溶于常见有机溶剂如甲醇、乙醇和二甲基亚砜（DMSO），但在水中溶解度较低。该化合物结构中含有甲基磺酰基和三氟异丙氧基团，赋予其独特的反应活性和生物活性。

2. 生物化学功能与重要性

本品作为一种含硫、氟的芳香族衍生物，在生物化学研究中表现出显著的活性。甲基磺酰基团可作为电子受体或氢键受体参与分子间相互作用，而三氟异丙氧基则增强了化合物的脂溶性和代谢稳定性。这些特性使其成为药物化学和农药研发中的重要中间体，尤其在设计靶向酶抑制剂或受体调节剂时具有潜在价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于医药和农药领域的创新研发。在医药方向，可作为激酶抑制剂或抗炎药物的关键合成砌块；在农药领域，其结构特性适用于开发高效低毒的除草剂或杀菌剂。此外，它还可用于材料科学中功能性高分子单体的制备，或作为荧光标记物的前体化合物。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C 下避光密封保存，长期储存需充惰性气体保护。开封后应避免反复冻融，使用时需在干燥惰性气氛（如氮气）下操作。溶解推荐使用无水 DMSO 配制母液，并根据实验需求进一步稀释。操作时需佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩，确保通风良好。

5. 质量控制与安全信息

本品通过 HPLC 检测纯度 ≥96%，批次间质量稳定。安全数据表明，其急性毒性为中等（LD₅₀ 大鼠经口 >500 mg/kg），对皮肤和眼睛有刺激性。废弃物处理需符合危

险化学品规范，避免直接排放至环境中。提供完整的MSDS报告，包含毒理学数据、生态影响及应急处理措施，用户应严格遵循实验室安全规程使用。