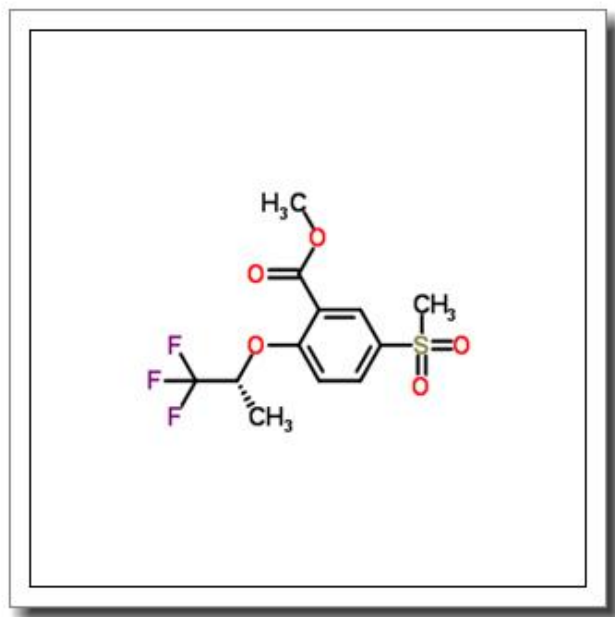


Methyl 5-(methylsulfonyl)-2-[[[(2R)-1,1,1-trifluoro-2-propanyl]oxy]benzoate

Methyl 5-(methylsulfonyl)-2-[[[(2R)-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-[[[(2R)-1,1,1-trifluoro-2-propanyl]oxy]benzoate
中文名称	Methyl 5-(methylsulfonyl)-2-[[[(2R)-1,1,1-trifluoro-2-propanyl]oxy]benzoate
CAS 号	845617-21-2
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性粉末，化学名称为 Methyl 5-(methylsulfonyl)-2-[[(2R)-1,1,1-trifluoro-2-propanyl]oxy]benzoate，CAS 号为 845617-21-2，分子式为 C₁₂H₁₃F₃O₅S，分子量为 326.289。其纯度 ≥96%，具有明确的立体构型（R 构型），结构中包含甲磺酰基、三氟异丙氧基及苯甲酸甲酯等活性基团，赋予其独特的化学稳定性和反应活性。该化合物在常温下稳定，易溶于有机溶剂如 DMSO、甲醇和乙腈，微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为含氟芳香族衍生物，本品可通过磺酰基和酯键参与亲核取代反应，同时三氟异丙氧基的立体位阻效应使其在酶抑制或受体结合中表现出高选择性。其分子设计常用于药物中间体或生物活性分子的结构修饰，特别是在抗炎、抗肿瘤及中枢神经系统药物研发中具有潜在应用价值。

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合成研究。在医药化学中，可作为激酶抑制剂或 G 蛋白偶联受体调节剂的关键片段；在农药开发中，其含氟结构可能增强化合物的杀虫或除草活性。此外，它还可作为荧光标记物或探针合成的起始原料，用于生化分析。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 -20° C 干燥环境中，避免光照和潮湿。开封后需充惰性气体保护以延长稳定性。使用时需在通风橱中操作，佩戴防护手套和护目镜。溶解推荐使用高纯度有机溶剂，并避免与强氧化剂或酸碱接触。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 和 NMR 严格检测，确保纯度及结构准确性。安全数据表明，其可能对眼睛和皮肤有刺激性，操作时应遵循 GHS 标准，危险代码为 H315-H319。如接触

皮肤，立即用大量清水冲洗；若吸入，移至空气新鲜处。废弃物需按危险化学品规范处置。

注：以上信息基于现有研究数据，具体应用需进一步实验验证。建议用户在使用前查阅最新文献或进行小试评估。