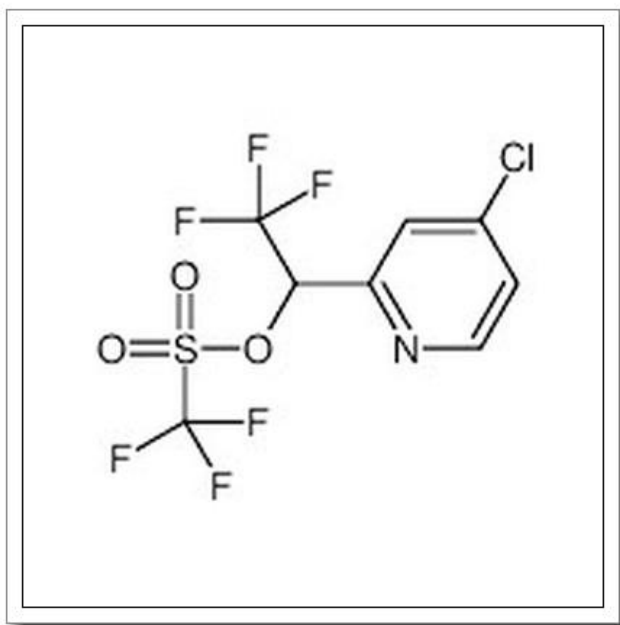


1-(4-氯吡啶-2-基)-2,2,2-三氟乙基三氟甲磺酸酯

*[1-(4-chloropyridin-2-yl)-2,2,2-trifluoroethyl]
trifluoromethanesulfonate*



产品基本信息

属性	值
化学名称	[1-(4-chloropyridin-2-yl)-2,2,2-trifluoroethyl] trifluoromethanesulfonate
中文名称	1-(4-氯吡啶-2-基)-2,2,2-三氟乙基三氟甲磺酸酯
CAS 号	1356087-54-1
分子式	C8H4ClF6NO3S
分子量	343.631
纯度	>96%

产品说明

1-(4-氯吡啶-2-基)-2, 2, 2-三氟乙基三氟甲磺酸酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为[1-(4-chloropyridin-2-yl)-2, 2, 2-trifluoroethyl] trifluoromethanesulfonate，是一种含氟有机磺酸酯类化合物。其分子式为 C₈H₄ClF₆N₃O₃S，分子量 343.631，CAS 号为 1356087-54-1。该化合物为无色至淡黄色液体，纯度>96%，具有显著的热稳定性与化学惰性。三氟甲磺酸酯基团赋予其强离去基团特性，而 4-氯吡啶结构则增强了分子在亲核取代反应中的活性。

2. 生物化学功能与重要性

作为三氟甲磺酸酯衍生物，该化合物在有机合成中可作为高效烷基化试剂，其三氟甲基磺酰氧基（OTf）的强吸电子效应能显著提升反应速率。在生物共轭化学中，4-氯吡啶结构可与含巯基的生物分子发生选择性反应，这一特性使其在蛋白质修饰和药物偶联领域具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于以下领域：医药中间体合成，特别是含氟药物的结构修饰；材料科学中功能化聚合物的制备；生物标记物开发中的连接臂构建。具体应用于 Suzuki 偶联、Negishi 偶联等交叉偶联反应，以及作为亲电试剂参与 C-C 键和 C-N 键的形成反应。

4. 储存条件与使用建议

建议在-20℃惰性气体（如氩气）环境下避光保存，开封后需充氮密封。使用时应于干燥手套箱中操作，避免接触水分。溶解性测试表明其易溶于乙腈、二氯甲烷等极性有机溶剂，推荐反应溶剂为无水 THF 或 DMF。实验后残余物需用 5%碳酸氢钠溶液淬灭处理。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度>96%，核磁共振（¹H NMR、¹⁹F NMR）和质谱（HRMS）验证结构。安全数据表明该化合物对呼吸道和皮肤有刺激性，操作需佩戴护目镜与防化

手套。遇水可能释放腐蚀性氟化氢，应急处理需使用钙 gluconate 凝胶。废弃物应归类为有害化学废物处理，符合 UN3286 危险品运输标准。