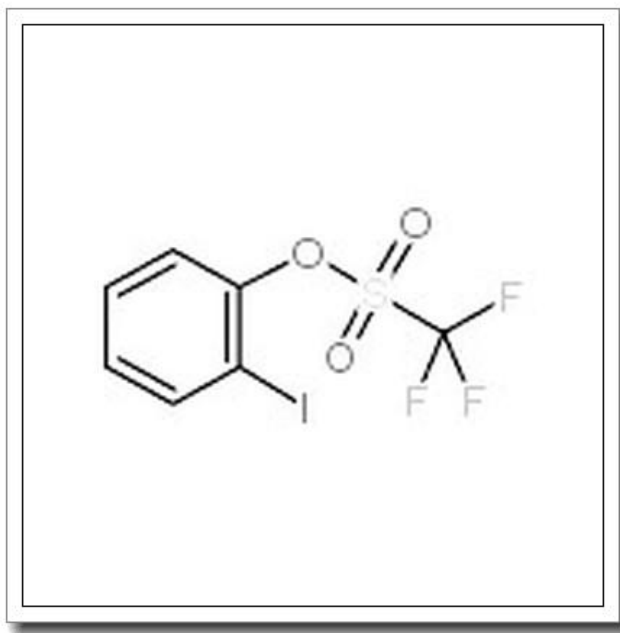


2-碘苯基三氟甲磺酸酯

(2-iodophenyl) trifluoromethanesulfonate



产品基本信息

属性	值
化学名称	(2-iodophenyl) trifluoromethanesulfonate
中文名称	2-碘苯基三氟甲磺酸酯
CAS 号	129112-26-1
分子式	C7H4F3IO3S
分子量	352.07
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

2-碘苯基三氟甲磺酸酯 ((2-iodophenyl) trifluoromethanesulfonate) 是一种有机化合物, CAS 号为 129112-26-1, 分子式为 $C_7H_4F_3IO_3S$, 分子量为 352.07。该化合物为无色至淡黄色液体或固体, 纯度通常高于 96%。其结构中包含碘苯基和三氟甲磺酸酯基团, 具有较高的反应活性, 尤其在偶联反应和亲核取代反应中表现突出。三氟甲磺酸酯基团作为优良的离去基团, 使其在有机合成中具有重要价值。

2. 生物化学功能与重要性

2-碘苯基三氟甲磺酸酯在生物化学领域主要用于构建复杂有机分子骨架, 尤其在药物中间体和功能材料的合成中发挥关键作用。其碘苯基结构可通过过渡金属催化 (如钯催化) 实现交叉偶联反应, 而三氟甲磺酸酯基团则易于被亲核试剂取代, 为引入其他官能团提供了便利。这些特性使其成为现代有机合成和药物研发中的重要试剂。

3. 主要应用领域与具体用途

该化合物广泛应用于医药、农药和材料科学领域。在医药研发中, 它常用于合成具有生物活性的芳香族化合物或作为关键中间体参与多步反应。在农药领域, 可用于制备含碘或含氟的活性成分。此外, 在功能材料合成中, 它可作为构建共轭体系或高分子材料的起始原料。具体用途包括 Suzuki 偶联、Heck 反应等过渡金属催化反应, 以及作为三氟甲磺酸酯化试剂使用。

4. 储存条件与使用建议

2-碘苯基三氟甲磺酸酯需在避光、干燥、低温条件下储存, 推荐温度为 2-8°C, 并置于惰性气体 (如氮气) 保护下以延长稳定性。开封后应尽快使用, 避免反复冻融。使用时需在通风橱中操作, 避免直接接触皮肤或吸入蒸气。建议佩戴防护手套、护目镜和实验服, 并在惰性溶剂 (如无水 THF 或 DMF) 中溶解后使用。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和 NMR 严格检测, 纯度均一性控制在 96% 以上。其具有刺激性,

可能对皮肤、眼睛和呼吸系统造成伤害，操作时应严格遵守化学品安全规范。若不慎接触，应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物需按照有机卤化物处理标准进行处置，避免环境污染。运输和储存需符合危险化学品管理规定，远离氧化剂和强碱。