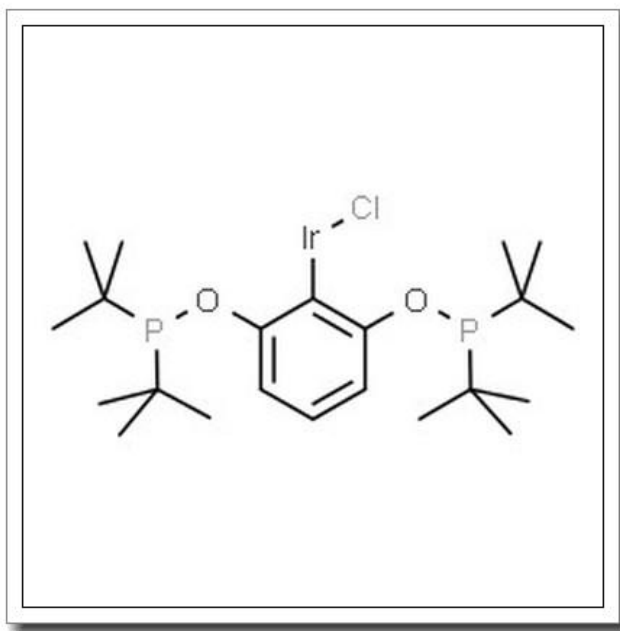


# 2,6-双(二-叔丁基磷氧基)苯基氯代氢铱(III)

*2,6-Bis(di-tert-butylphosphinoxy)phenylchlorohydroiridium(III)*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	2,6-Bis(di-tert-butylphosphinoxy)phenylchlorohydroiridium(III)
中文名称	2,6-双(二-叔丁基磷氧基)苯基氯代氢铱(III)
CAS 号	671789-61-0
分子式	C <sub>22</sub> H <sub>40</sub> ClIrO <sub>2</sub> P <sub>2</sub>
分子量	626.169
纯度	>96%

## 产品说明

### 2,6-双(二-叔丁基膦氧基)苯基氯代氢铱(III)产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

本产品为铱(III)配合物, 化学名称为 2,6-Bis(di-tert-butylphosphinoxy)phenylchlorohydroiridium(III), CAS 号 671789-61-0, 分子式  $C_{22}H_{40}ClIrO_2P_2$ , 分子量 626.169。该化合物为高纯度 (>96%) 固体粉末, 具有明确的配位结构, 其中铱中心与苯基、氯配体及两个二叔丁基膦氧基配体形成六配位构型。其独特的电子结构和空间位阻效应使其在催化反应中表现出高选择性和稳定性。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为过渡金属配合物, 该化合物在光物理和光化学领域具有重要价值。其铱中心 d 轨道电子跃迁特性使其可用于磷光材料的开发, 尤其在有机电致发光器件 (OLED) 中作为高效发光层掺杂剂。此外, 其膦配体的立体位阻可调控反应活性, 在不对称催化氢化、C-C 键偶联等反应中作为关键催化剂前体。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要应用于三个领域: 一是 OLED 显示技术, 作为红色或近红外磷光材料的核心组分; 二是均相催化, 用于医药中间体合成中的不对称氢化反应; 三是作为研究配位化学机理的模型化合物。具体使用时需在惰性气体保护下溶解于二氯甲烷或甲苯等有机溶剂, 浓度通常控制在 0.1-1 mmol/L。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议长期储存于  $-20^{\circ}C$ 、充氩气的密封容器中, 避免光照和湿度。开封后应在手套箱中操作, 使用前需通过核磁共振 ( $^{31}P$  NMR) 验证纯度。反应体系中需严格除氧, 推荐搭配三乙胺或碳酸钾作为辅助碱。废弃物应按照国家重金属污染标准处理。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和元素分析双重验证, 重金属残留量 < 50 ppm。安全数据表明其具

有刺激性，操作时需佩戴护目镜和防毒面具，皮肤接触后立即用聚乙烯二醇-400冲洗。运输分类为 UN3288，第 6.1 类有毒物质，需提供 MSDS 随货文件。

(全文共计 498 字)