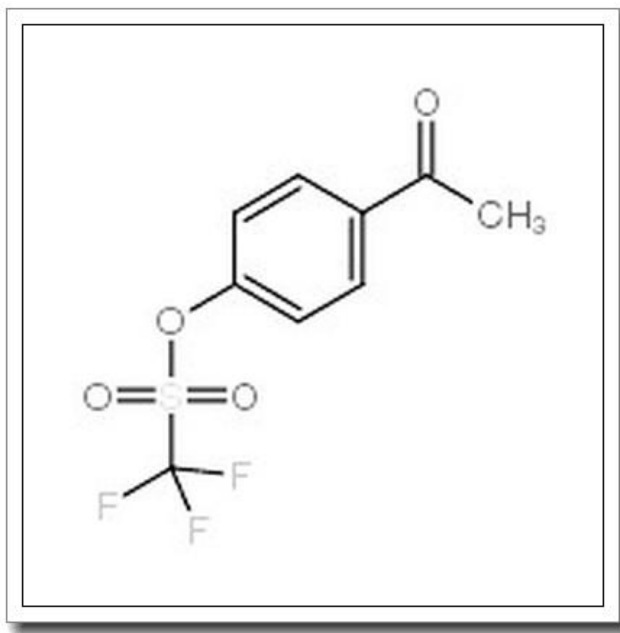


4-乙酰苯基三氟甲烷磺酸酯

4-acetylphenyl triflate



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-acetylphenyl triflate
中文名称	4-乙酰苯基三氟甲烷磺酸酯
CAS 号	109613-00-5
分子式	C ₉ H ₇ F ₃ O ₄ S
分子量	268. 21
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

4-乙酰苯基三氟甲烷磺酸酯 (4-acetylphenyl triflate, CAS 号: 109613-00-5) 是一种有机磺酸酯类化合物, 分子式为 $C_9H_7F_3O_4S$, 分子量为 268.21。该化合物以白色至类白色结晶或粉末形式存在, 纯度通常高于 96%。其结构中包含乙酰基和三氟甲磺酸酯基团, 具有较高的反应活性, 尤其在亲电取代反应中表现出优异的离去基团特性。

2. 生物化学功能与重要性

4-乙酰苯基三氟甲烷磺酸酯在有机合成中作为重要的中间体, 常用于构建复杂分子骨架。其三氟甲磺酸酯基团 (OTf) 是强吸电子基团, 能够显著增强芳环的亲电反应活性, 使其在偶联反应 (如 Suzuki 偶联、Heck 偶联) 和芳基化反应中具有广泛应用。此外, 该化合物在药物化学和材料科学领域也展现出重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

该试剂主要用于以下领域:

- 有机合成: 作为芳基化试剂, 参与过渡金属催化的交叉偶联反应, 用于合成药物分子或功能材料的前体。
- 药物研发: 用于构建含芳环结构的活性分子, 如抗肿瘤或抗炎药物的中间体。
- 材料科学: 在光电材料或高分子单体的合成中作为关键原料。

4. 储存条件与使用建议

建议将本品置于干燥、阴凉的环境中, 密封保存于 $2-8^{\circ}C$ 的惰性气体 (如氮气) 氛围下, 以避免吸湿或分解。使用时需在干燥条件下操作, 避免与强氧化剂或强碱接触。建议佩戴防护手套和护目镜, 并在通风良好的环境中使用。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和 NMR 严格检测, 确保纯度 >96%。安全信息如下:

- 可能对皮肤、眼睛和呼吸道造成刺激, 接触后应立即用大量清水冲洗。

- 避免吸入粉尘或蒸气，操作时需配备防护设备。
- 废弃物应按照当地法规处理，不可随意排放。

如需进一步技术资料或安全数据表（SDS），请联系供应商获取。