

4-溴-2-碘(三氟甲氧基)苯

4-Bromo-2-iodo-1-(trifluoromethoxy)benzene



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-Bromo-2-iodo-1-(trifluoromethoxy)benzene
中文名称	4-溴-2-碘(三氟甲氧基)苯
CAS 号	154065-33-5
分子式	C ₇ H ₃ BrF ₃ I
分子量	366.902
纯度	>96%

产品说明

4-溴-2-碘(三氟甲氧基)苯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

4-溴-2-碘(三氟甲氧基)苯 (CAS 号: 154065-33-5) 是一种含卤素取代基的芳香族化合物, 分子式为 $C_7H_3BrF_3IO$, 分子量为 366.902。该化合物以白色至淡黄色结晶或粉末形式存在, 纯度高于 96%, 具有显著的化学稳定性和反应活性。其结构中的溴、碘和 trifluoromethoxy 基团使其成为有机合成中重要的中间体, 尤其在构建复杂分子骨架时表现出独特优势。

2. 生物化学功能与重要性

作为多功能卤代芳烃, 该化合物在生物化学领域主要用于药物分子和功能材料的合成。其碘原子可通过偶联反应 (如 Suzuki、Heck 反应) 引入其他官能团, 而三氟甲氧基的强吸电子效应能显著调节分子电子云密度, 影响药物活性或材料性能。在药物研发中, 此类结构常用于抗菌、抗肿瘤先导化合物的修饰。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品广泛应用于以下领域:

- 1) 医药中间体: 用于合成含三氟甲氧基的活性药物成分 (APIs), 如抗病毒和中枢神经系统药物。
- 2) 材料科学: 作为液晶材料、有机发光二极管 (OLED) 的构建单元。
- 3) 农药化学: 参与高效低毒农药分子的结构优化。
- 4) 科研试剂: 在过渡金属催化反应中作为关键底物。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 、避光、干燥惰性气体 (如氮气) 环境下密封保存, 避免与强氧化剂、强酸强碱接触。使用前需恢复至室温以减少结露风险。操作时需在通风橱中进行, 佩戴防化手套、护目镜及实验服。溶解性测试表明其易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂, 推荐使用前通过 TLC 或 HPLC 验证纯度。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC、NMR 和质谱严格质检，确保批次稳定性。安全数据表明其具有刺激性，可能引起皮肤、眼睛和呼吸道不适。安全术语 H315-H319-H335 提示需防范皮肤接触、眼睛损伤和吸入风险。废弃物处理需遵循当地法规，建议采用专业化学废弃物回收程序。

（注：本说明基于现有研究数据，实际应用需结合具体实验条件调整。）