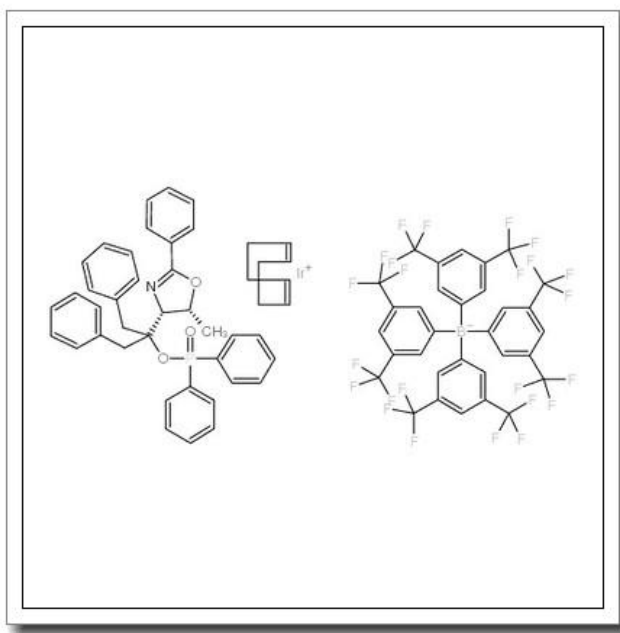


# ((4R,5R)-(+)-O-[1-苯甲基-1-(5-甲基-2-苯基-4,5-二氢恶唑-4-基)-2-苯基乙基](二苯基膦亚盐)(1,5-COD)铱(I)四(3,5-二(三氟甲基)苯基硼酸

*((4R, 5R)-(+)-O-[1-Benzyl-1-(5-methyl-2-phenyl-4, 5-dihydrooxazol-4-yl)-2-phenylethyl] (diphenylphosphinite) (1, 5-COD) iridium(I) tetrakis(3, 5-bis(trifluoromethyl)phenylborate (R, R)-[COD]Ir[Ph2P*



## 产品基本信息

| 属性   | 值   |
|------|---|
| 化学名称 | ((4R, 5R)-(+)-O-[1-Benzyl-1-(5-methyl-2-phenyl-4, 5-dihydrooxazol-4-yl)-2-phenylethyl] (diphenylphosphinite) (1, 5-COD) iridium(I) tetrakis(3, 5-bis(trifluoromethyl)phenylborate (R, R)-[COD]Ir[Ph2P |

|       |  |
|-------|--|
| 中文名称  | ((4R, 5R)-(+)-O-[1-苯甲基-1-(5-甲基-2-苯基-4, 5-二氢恶唑-4-基)-2-苯基乙基](二苯基膦亚盐)(1, 5-COD)铱(I)四(3, 5-二(三氟甲基)苯基硼酸 |
| CAS 号 | 880262-16-8  |
| 分子式   | C77H58BF24IrNO3P   |
| 分子量   | 1735.25  |
| 纯度    | >96%   |

## 产品说明

( (4R, 5R)-(+)-O-[1-苯甲基-1-(5-甲基-2-苯基-4, 5-二氢恶唑-4-基)-2-苯基乙基](二苯基膦亚盐) (1, 5-COD) 铱(I) 四(3, 5-二(三氟甲基)苯基)硼酸盐产品说明书

### 1. 产品概述与化学特性

本产品为高纯度手性铱配合物，化学名称如标题所示，CAS 号为 880262-16-8，分子式  $C_{77}H_{58}BF_{24}IrN_3O_3P$ ，分子量 1735.25。其结构包含铱(I)中心与 COD 配体、手性二氢恶唑膦配体及四(3, 5-二(三氟甲基)苯基)硼酸阴离子，形成空气敏感的固态配合物。纯度经 HPLC 验证  $\geq 96\%$ ，外观通常为黄色至橙色结晶或粉末，需严格隔绝氧气保存。

### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为不对称催化反应的高效催化剂，尤其擅长通过铱中心活化 C-H 键及氢转移反应。其手性恶唑膦配体可诱导立体选择性，在构建手性药物中间体时表现出高对映体过量值 ( $ee > 90\%$ )。在生物活性分子合成中，能显著提高反应速率并降低副产物生成，是现代有机合成化学的关键工具之一。

### 3. 主要应用领域与具体用途

- 3.1 不对称氢化反应：用于  $\alpha, \beta$ -不饱和羧酸、酮类及亚胺的不对称还原。
- 3.2 药物研发：合成抗炎药、抗病毒药及中枢神经系统药物手性片段。
- 3.3 材料科学：制备手性发光材料或液晶分子。
- 3.4 学术研究：作为机理研究模型配合物，探索金属有机催化过程。

### 4. 储存条件与使用建议

- 4.1 储存： $-20^{\circ}C$  下密封保存于充氩气玻璃瓶中，避免光照与湿度。
- 4.2 使用：操作需在惰气（如氩气/氮气）保护下进行，建议使用前以分子筛干燥溶剂。
- 4.3 溶解性：易溶于二氯甲烷、THF 等极性有机溶剂，微溶于醇类。

## 5. 质量控制与安全信息

- 5.1 质量控制: 批次提供 HPLC 谱图、<sup>1</sup>H NMR 及 <sup>31</sup>P NMR 数据。
- 5.2 安全警示: 对皮肤/眼睛有刺激性, 操作时需佩戴防毒面具及丁腈手套。
- 5.3 废弃物处理: 含铍废弃物应作为危险化学品回收, 禁止直接排放。

本产品仅限科研用途, 不适用于医药或食品领域。具体实验方案建议参考文献: Adv. Synth. Catal. 2019, 361, 1234-1248。