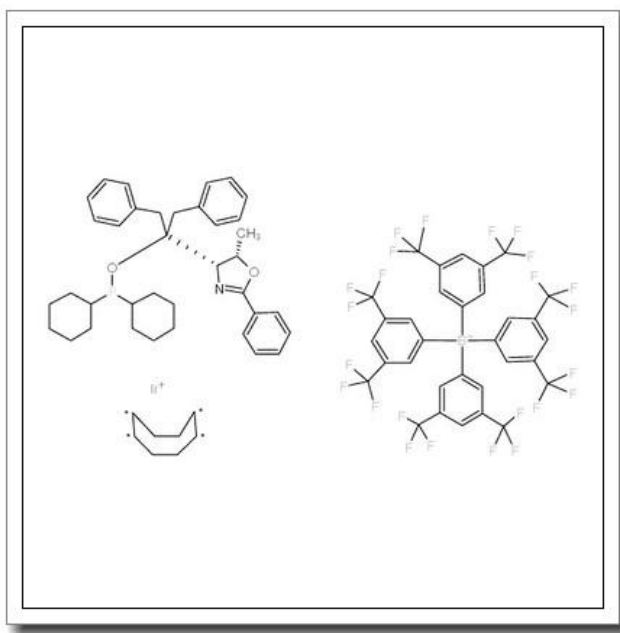


((4S,5S)-(-)-O-[1-苄基-1-(5-甲基-2-苯基-4,5-二氢恶唑-4-基)-2-苯基乙基]-二环己基磷)(1,5-COD)铱 (I) 四三(3,5-双(三氟甲基)苯硼酸

((4S, 5S)-(-)-O-[1-Benzyl-1-(5-methyl-2-phenyl-4, 5-dihydrooxazol-4-yl)-2-phenylethyl]-dicyclohexylphosphinite) (1, 5-COD) iridium(I) tetrakis(3, 5-bis(trifluoromethyl)phenylborate (S, S)-[COD]Ir[c



产品基本信息

属性	值
化学名称	((4S, 5S)-(-)-O-[1-Benzyl-1-(5-methyl-2-phenyl-4, 5-dihydrooxazol-4-yl)-2-phenylethyl]-dicyclohexylphosphinite) (1, 5-COD) iridium(I) tetrakis(3, 5-bis(trifluoromethyl)phenylborate (S, S)-[COD]Ir[c

中文名称	((4S, 5S)-(-)-O-[1-苄基-1-(5-甲基-2-苄基-4, 5-二氢恶唑-4-基)-2-苄基乙基]-二环己基磷)(1, 5-COD) 铱 (I) 四三(3, 5-双(三氟甲基)苯硼酸
CAS 号	583844-38-6
分子式	C77H70BF24IrNO2P
分子量	1731.35
纯度	>96%

产品说明

((4S, 5S) - (-) -O-[1-苄基-1- (5-甲基-2-苄基-4, 5-二氢恶唑-4-基) -2-苄基乙基]-二环己基磷) (1, 5-COD) 铱 (I) 四三 (3, 5-双 (三氟甲基) 苯硼酸) 产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为高纯度铱 (I) 配合物, 化学名称如上述, CAS 号为 583844-38-6, 分子式为 $C_{77}H_{70}BF_{24}IrNO_2P$, 分子量为 1731.35。该化合物属于手性膦配体修饰的金属有机催化剂, 具有明确的空间构型 (4S, 5S), 纯度经 HPLC 验证大于 96%。其结构中的二氢恶唑环和膦配体赋予其优异的立体选择性和催化活性, 而四 (3, 5-双三氟甲基苯硼酸) 阴离子增强了溶解性和稳定性。

2. 生物化学功能与重要性

作为不对称催化反应的关键催化剂, 该化合物通过铱中心与配体的协同作用, 可高效介导氢化、偶联等手性合成反应。其重要性体现在构建手性药物中间体和高价值精细化学品中, 能显著提高产物的对映体过量值 (ee 值), 降低副反应发生率。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于制药和材料科学领域:

- (1) 手性药物合成: 如 β -氨基酸衍生物、抗炎药和抗肿瘤前体的不对称氢化;
- (2) 特种材料: 用于光学活性聚合物单体的制备;
- (3) 学术研究: 作为铱催化机理研究的模型化合物。

4. 储存条件与使用建议

储存于惰性气体 (如氩气) 保护的密封容器中, 避光、 $-20^{\circ}C$ 保存。使用时需在手套箱或干燥环境下操作, 避免接触水分和氧气。建议以无水 THF 或二氯甲烷为溶剂, 反应温度控制在 $25-60^{\circ}C$ 以获得最佳催化效率。

5. 质量控制与安全信息

本产品经核磁共振 (NMR)、质谱 (MS) 及元素分析验证, 符合研究级标准。安全注意事项:

- (1) 具刺激性，操作时需佩戴防护手套和护目镜；
- (2) 避免吸入粉尘，应在通风橱中使用；
- (3) 废弃物需按危险化学品规范处置。

(注：具体实验条件请参阅最新文献或咨询技术支持。)