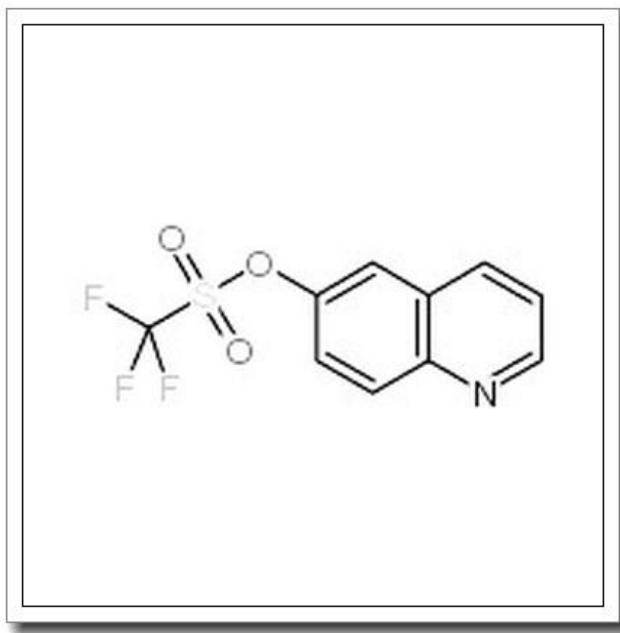


6-喹啉基三氟甲烷磺酸酯

quinolin-6-yl trifluoromethanesulfonate



产品基本信息

属性	值
化学名称	quinolin-6-yl trifluoromethanesulfonate
中文名称	6-喹啉基三氟甲烷磺酸酯
CAS 号	173089-80-0
分子式	C ₁₀ H ₆ F ₃ N ₃ O ₃ S
分子量	277.22
纯度	>96%

产品说明

6-喹啉基三氟甲烷磺酸酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

6-喹啉基三氟甲烷磺酸酯 (quinolin-6-yl trifluoromethanesulfonate, CAS 号 173089-80-0) 是一种高活性有机磺酸酯化合物, 分子式为 $C_{10}H_6F_3N_0S_3$, 分子量 277.22。该化合物以喹啉环为母核, 6 位羟基经三氟甲磺酰化修饰, 形成稳定的磺酸酯结构。其纯度超过 96%, 常温下呈白色至类白色结晶或粉末状, 易溶于极性有机溶剂 (如二氯甲烷、乙腈), 但对湿气敏感, 需严格隔绝水分保存。

2. 生物化学功能与重要性

作为三氟甲磺酸酯类衍生物, 该化合物具有显著的亲电反应活性, 其磺酸酯基团可作为优良的离去基团参与偶联反应 (如 Suzuki、Heck 反应)。喹啉骨架的引入赋予其配位能力和生物活性潜力, 在药物化学中常用于构建含氮杂环结构。其高反应选择性使其成为复杂分子合成中的关键中间体。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品广泛应用于医药研发和有机合成领域。在药物设计中, 用于修饰喹啉类抗疟疾或抗肿瘤化合物的 6 位官能团; 在材料科学中, 可作为制备光电功能材料的前体。具体用途包括: 过渡金属催化交叉偶联反应的底物、核酸类似物合成的砌块, 以及作为激酶抑制剂类药物的中间体。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 、惰性气体 (如氩气) 保护下避光保存, 开封后需充氮密封。使用前需恢复至室温并避免接触湿气, 推荐在手套箱或干燥环境下操作。溶解时优先选用无水级溶剂, 并现配现用。反应体系中需严格控制水分含量 ($<0.1\%$), 以防磺酸酯水解失效。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 核磁共振 ($^1H/^{13}C$ NMR) 和质谱 (MS) 验证结构。操作时需佩戴防护手套、护目镜, 并在通风橱中进行。其粉末可能刺激呼吸道和黏

膜，接触皮肤后应立即用大量清水冲洗。废弃物需按危险化学品规范处置，避免强氧化剂接触。安全数据表（SDS）可随货提供。

注：本产品仅限科研用途，不适用于临床或食品领域。具体应用需结合实验方案优化条件。