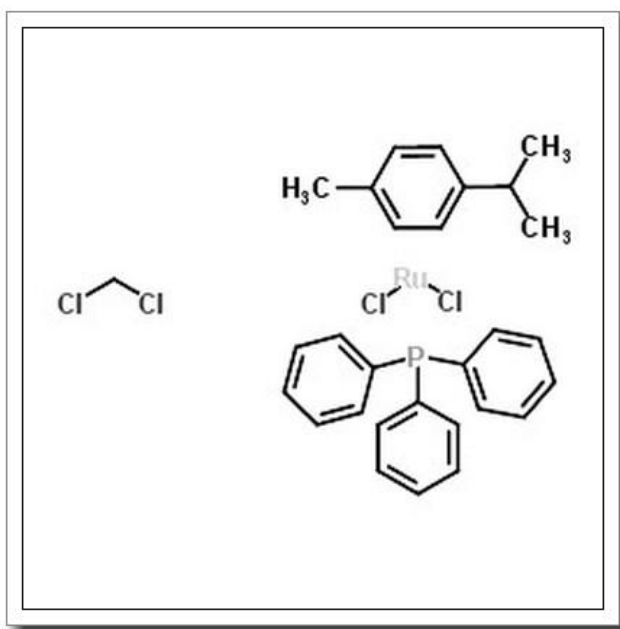


二氯(对甲基异丙基苯基)三苯膦

*dichloromethane; dichlororuthenium; 1-isopropyl-4-methyl-
benzene; triphenylphosphane*



产品基本信息

属性	值
化学名称	dichloromethane;dichlororuthenium;1-isopropyl-4-methyl-benzene;triphenylphosphane
中文名称	二氯(对甲基异丙基苯基)三苯膦
CAS 号	52490-94-5
分子式	C ₂₉ H ₃₁ Cl ₄ PRu
分子量	653.412
纯度	>96%

产品说明

二氯(对甲基异丙基苯基)三苯膦产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为含钌有机金属配合物，化学名称为二氯(对甲基异丙基苯基)三苯膦，CAS号 52490-94-5，分子式 $C_{29}H_{31}Cl_2PRu$ ，分子量 653.412。其结构包含钌金属中心与三苯膦配体、二氯配体及对甲基异丙基苯基配体的协同配位，形成稳定的四方平面构型。常温下呈橙红色至棕色结晶粉末，纯度 >96%，易溶于二氯甲烷、甲苯等有机溶剂，对空气敏感，需惰性气体保护。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为过渡金属催化剂的核心前体，在钌催化反应中表现出优异的电子转移能力和配体交换活性。其独特的电子效应和空间位阻特性，使其在碳-碳键偶联、烯烃复分解及不对称氢化等反应中具有关键作用，尤其在制药领域的手性合成中可显著提高立体选择性。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于有机合成与药物研发领域：

- (1) 作为钌催化剂的合成中间体，用于制备抗癌药物和抗病毒化合物的手性配体；
- (2) 在材料科学中用于合成导电高分子及光电功能材料；
- (3) 作为均相催化剂参与交叉偶联反应，如 Suzuki-Miyaura 偶联等。

4. 储存条件与使用建议

储存于-20℃惰性气体（氩气或氮气）保护的密闭容器中，避免光照与湿气。使用前需在手套箱中解冻，溶解时建议采用脱气处理的有机溶剂。反应体系需严格除氧，推荐配合三乙胺等碱基使用以增强催化活性。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC 和核磁共振 ($^1H/^{31}P$ NMR) 双重验证纯度，重金属残留量 <50ppm。该化合物具潜在刺激性，操作时需佩戴防毒面具及丁腈手套，避免吸入粉尘或接触皮

肤。废弃物应按照危险有机金属化合物标准处理，泄露时用惰性吸附材料覆盖后收集至专用容器。

（注：本说明基于实验室环境编写，实际应用需结合具体工艺参数调整。）