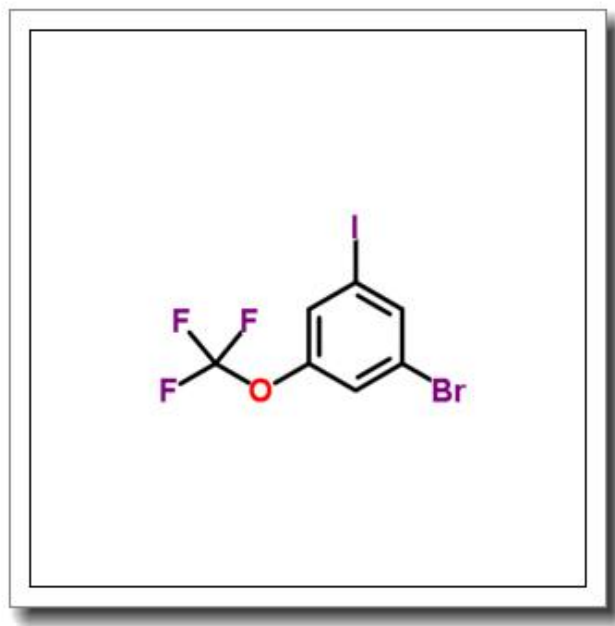


1-溴-3-碘-5-三氟甲氧基苯

1-Bromo-3-iodo-5-(trifluoromethoxy)benzene



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-Bromo-3-iodo-5-(trifluoromethoxy)benzene
中文名称	1-溴-3-碘-5-三氟甲氧基苯
CAS 号	845866-78-6
分子式	C ₇ H ₃ BrF ₃ I ₁ O
分子量	366.902
纯度	≥96%

产品说明

1-溴-3-碘-5-三氟甲氧基苯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

1-溴-3-碘-5-三氟甲氧基苯 (CAS 号: 845866-78-6) 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。该化合物由苯环骨架修饰而成, 包含溴、碘和三氟甲氧基三个关键官能团, 赋予其独特的电子效应和空间位阻特性。其高纯度 ($\geq 96\%$) 确保了反应活性和产物稳定性, 适用于精密有机合成与药物化学研究。

2. 生物化学功能与重要性

作为多卤代芳烃衍生物, 该化合物在交叉偶联反应 (如 Suzuki、Negishi 偶联) 中表现出高反应活性, 可作为关键中间体引入三氟甲氧基等药效团。三氟甲氧基的强吸电子特性可显著调节分子脂溶性和代谢稳定性, 在药物设计中用于优化先导化合物的生物利用度。此外, 溴与碘的双重卤素取代为后续官能化提供了选择性修饰位点。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品广泛应用于医药研发、材料科学及农用化学品合成领域。在医药化学中, 用于构建抗炎、抗肿瘤药物的含氟芳环结构; 在有机光电材料领域, 可作为液晶单体或 OLED 材料的合成前体; 在农药化学中, 用于开发高效含氟杀虫剂。其特异性结构也适用于同位素标记或荧光探针的制备。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 $-20^{\circ}C$ 至 $4^{\circ}C$ 的干燥环境中, 避光防潮。开封后需充惰性气体 (如氮气) 保护以防止氧化。使用时应佩戴防护手套、护目镜及防毒面具, 于通风橱中操作。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 监测纯度。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC、NMR 及质谱严格质检, 符合国际化学品标准。安全数据表明其具有

刺激性，可能引起皮肤、眼睛及呼吸道损伤。操作时需避免与强氧化剂接触，废弃处理应遵循危险化学品管理条例。提供 MSDS（材料安全数据表）备查，紧急情况请立即用大量清水冲洗并就医。

注：本说明基于现有研究数据编制，具体应用需结合实验条件优化。更多技术参数请联系专业支持团队。