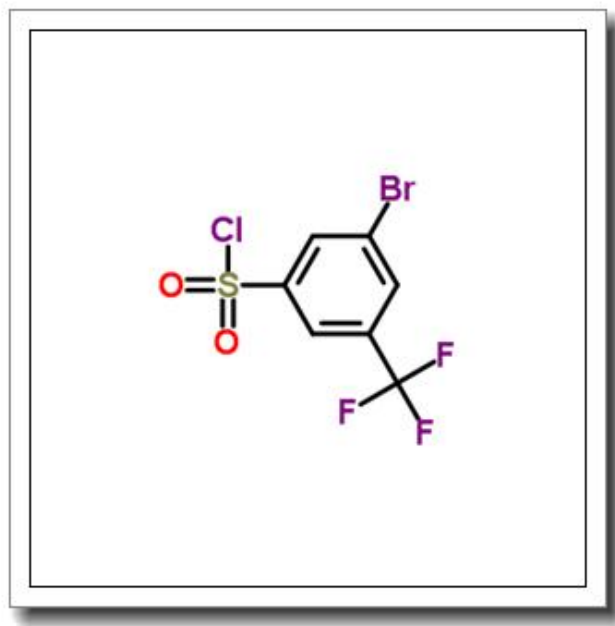


3-溴-5-(三氟甲基)苯磺酰氯

3-bromo-5-(trifluoromethyl)benzenesulfonyl chloride



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-bromo-5-(trifluoromethyl)benzenesulfonyl chloride
中文名称	3-溴-5-(三氟甲基)苯磺酰氯
CAS 号	351003-46-8
分子式	C7H3BrClF3O2S
分子量	323.515
纯度	≥ 96%

产品说明

3-溴-5-(三氟甲基)苯磺酰氯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3-溴-5-(三氟甲基)苯磺酰氯 (CAS 号: 351003-46-8) 是一种高反应性磺酰氯衍生物, 分子式为 $C_7H_3BrClF_3O_2S$, 分子量 323.515。该化合物为白色至类白色结晶或粉末, 纯度 $\geq 96\%$, 具有显著的吸湿性和空气敏感性。其结构中同时包含溴原子和三氟甲基基团, 赋予其独特的电子效应和空间位阻, 使其在亲核取代反应中表现出高活性。

2. 生物化学功能与重要性

作为磺酰化试剂, 该化合物可通过磺酰氯基团 ($-SO_2Cl$) 与氨基或羟基发生缩合反应, 广泛应用于磺酰胺类化合物的合成。三氟甲基的强吸电子特性可调节分子极性, 而溴原子则为后续偶联反应 (如 Suzuki 反应) 提供关键位点。这些特性使其在药物化学和材料科学中成为重要的中间体, 尤其用于构建具有生物活性的杂环结构。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于以下领域: 医药研发中作为激酶抑制剂或抗菌药物的合成前体; 农药化学中用于制备含氟磺酰胺类除草剂; 材料科学中作为功能高分子单体的修饰剂。典型反应包括与胺类生成磺酰胺、与醇类形成磺酸酯, 以及通过溴原子参与钯催化交叉偶联反应。

4. 储存条件与使用建议

需严格在惰性气体 (如氩气) 保护下密封保存, 温度控制在 $2-8^{\circ}C$, 避免光照和湿气。开封后建议一次性使用完毕, 或分装后充氮保存。操作时需在通风橱中进行, 佩戴防化手套和护目镜。溶解推荐使用干燥的二氯甲烷或 THF, 反应体系需严格除水。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC 和 NMR 确保纯度 $\geq 96\%$, 残留溶剂符合 ICH 标准。该化合物具有腐蚀性,

接触皮肤或眼睛可能引起严重灼伤，应急处理需立即用大量清水冲洗 15 分钟并就医。运输分类为 8 类腐蚀品，UN 编号 3261，需贴有腐蚀性物质标识。废弃物处置应遵循当地法规，不可直接排入下水道。