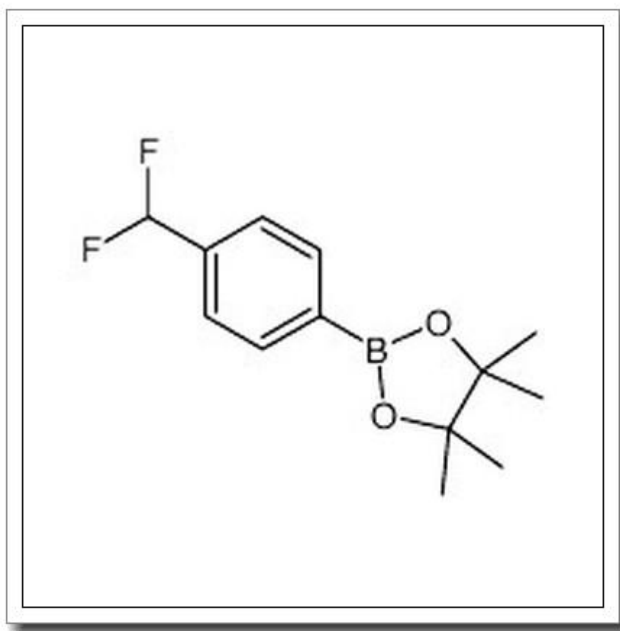


2-(4-(二氟甲基)苯基)-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二噁硼烷

2-[4-(difluoromethyl)phenyl]-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-[4-(difluoromethyl)phenyl]-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane
中文名称	2-(4-(二氟甲基)苯基)-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二噁硼烷
CAS 号	1234319-14-2
分子式	C ₁₃ H ₁₇ BF ₂ O ₂
分子量	254.081
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

2-[4-(二氟甲基)苯基]-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二噁硼烷 (CAS 号: 1234319-14-2) 是一种有机硼化合物, 分子式为 $C_{13}H_{17}BF_2O_2$, 分子量为 254.081。该化合物以白色至类白色结晶或粉末形式存在, 纯度高于 96%。其结构中的二噁硼烷基团和二氟甲基苯基使其在有机合成中表现出高反应活性, 尤其是作为硼酸酯类中间体, 适用于 Suzuki-Miyaura 偶联等交叉偶联反应。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为硼酸酯衍生物, 在过渡金属催化反应中可作为关键的硼源试剂, 提供苯基硼酸酯结构单元。其二氟甲基的引入增强了化合物的脂溶性和代谢稳定性, 使其在药物化学和材料科学中具有独特价值。此外, 其稳定的四甲基二噁硼烷结构有助于减少副反应, 提高合成效率。

3. 主要应用领域与具体用途

- 药物研发: 用于构建含二氟甲基的芳环结构, 常见于抗肿瘤、抗炎药物候选分子的合成。
- 材料科学: 作为有机发光二极管 (OLED) 和液晶材料的中间体。
- 化学合成: 参与 Suzuki 偶联反应, 构建联芳基或杂芳基化合物。

4. 储存条件与使用建议

- 储存于惰性气体 (如氩气或氮气) 保护的密封容器中, 避免潮湿和光照, 推荐温度为 2-8° C。
- 使用前需在干燥环境下恢复至室温, 防止吸湿分解。操作时需佩戴防护手套、护目镜, 并在通风橱中进行。

5. 质量控制与安全信息

- 质量控制: 通过 HPLC 和 NMR 确保纯度 >96%, 并提供批次分析证书 (COA)。
- 安全信息: 该化合物对眼睛、皮肤有刺激性, 可能引起呼吸道不适。若不慎接触, 立即用大量清水冲洗并就医。废弃处理需遵循当地化学品管理法规。

本产品仅供科研用途，不适用于医药或食品领域。