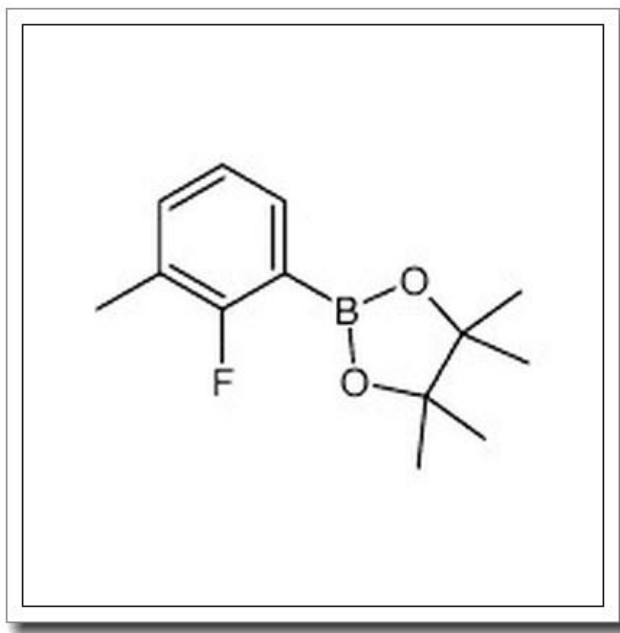


## 2-氟-3-甲基苯硼酸频那醇酯

*2-(2-fluoro-3-methylphenyl)-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane*



### 产品基本信息

属性	值
化学名称	2-(2-fluoro-3-methylphenyl)-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane
中文名称	2-氟-3-甲基苯硼酸频那醇酯
CAS 号	1192548-08-5
分子式	C <sub>13</sub> H <sub>18</sub> BF <sub>02</sub>
分子量	236.09
纯度	>96%

## 产品说明

### 2-(2-氟-3-甲基苯基)-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼杂环戊烷产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 2-(2-fluoro-3-methylphenyl)-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane, 中文名为 2-氟-3-甲基苯硼酸频那醇酯, CAS 号为 1192548-08-5。其分子式为  $C_{13}H_{18}BF_2$ , 分子量为 236.09, 纯度超过 96%。该化合物为白色至类白色结晶粉末, 属于有机硼酸酯类衍生物, 具有频那醇硼酯的典型结构特征, 其氟代甲基苯基结构赋予其独特的电子效应和空间位阻特性。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为 Suzuki-Miyaura 交叉偶联反应的关键中间体, 该硼酸酯可通过钯催化与芳基卤化物高效偶联, 构建碳-碳键。其分子中的硼原子表现出亲电性, 而氟原子的强吸电子效应可显著调节反应活性, 在复杂分子合成中实现高区域选择性和官能团兼容性。该特性使其在药物化学和材料科学领域具有不可替代的作用。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于医药中间体合成, 特别适用于抗肿瘤药物和中枢神经系统药物的结构修饰。在材料科学中, 可用于合成有机电致发光材料 (OLED) 的含氟芳香单体。具体用途包括: 作为偶联试剂参与多步合成反应、作为硼酸保护基团在温和条件下脱保护、以及作为探针分子用于氟核磁共振 ( $^{19}F$  NMR) 研究。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议在惰性气体 (如氩气或氮气) 保护下密封储存, 温度保持在 2-8°C 的干燥环境中, 避免与湿气和氧化剂接触。使用前需在干燥箱中恢复至室温, 开封后建议一次性使用完毕。反应体系中需严格除氧, 推荐以无水四氢呋喃或二甲氧基乙烷作为溶剂, 与钯催化剂 (如  $Pd(PPh_3)_4$ ) 配合使用时摩尔比宜控制在 1:1.05 至 1:1.2。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度  $\geq 96\%$ , 重金属含量符合 USP 标准。危险类别为刺激性化学品, 操作时应佩戴防尘口罩、化学护目镜及丁腈手套。若不慎接触皮肤, 需立即

用大量清水冲洗 15 分钟。废弃物处理需符合当地法规，建议采用碱水解（1M NaOH 溶液）降解后交由专业机构处置。

（注：本说明书技术参数基于批次检测报告，实际应用建议通过小试实验优化条件。）