

2-氟-3-甲氧基苯硼酸频那醇酯

2-(2-Fluoro-3-methoxyphenyl)-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-methoxyphenyl)-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane
中文名称	2-氟-3-甲氧基苯硼酸频那醇酯
CAS 号	1165936-00-4
分子式	C ₁₃ H ₁₈ BF ₃ O ₃
分子量	252.09
纯度	>96%

产品说明

2-氟-3-甲氧基苯硼酸频那醇酯产品说明

1. 产品概述与化学特性

2-氟-3-甲氧基苯硼酸频那醇酯（化学名称：2-(2-Fluoro-3-methoxyphenyl)-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane）是一种有机硼化合物，CAS 号为 1165936-00-4，分子式为 C₁₃H₁₈BF₃O₃，分子量为 252.09。该化合物为白色至类白色结晶或粉末，纯度通常高于 96%。其结构中的硼酸频那醇酯基团和芳香环上的氟、甲氧基取代基使其在有机合成中具有较高的反应活性和选择性。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为硼酸酯类衍生物，在 Suzuki-Miyaura 交叉偶联反应中表现出优异的性能，是构建复杂有机分子（如药物中间体和功能材料）的重要砌块。氟原子的引入可增强化合物的脂溶性和代谢稳定性，而甲氧基则可能参与氢键相互作用，影响分子识别和结合特性。

3. 主要应用领域与具体用途

- 药物研发：用于合成含氟芳香族药物中间体，尤其在抗肿瘤和中枢神经系统药物开发中具有潜在价值。
- 材料科学：作为有机光电材料（如 OLED 或半导体材料）的合成前体。
- 化学研究：在过渡金属催化反应中作为硼酸酯供体，用于 C-C 键形成反应。

4. 储存条件与使用建议

- 储存条件：需密封保存于干燥、阴凉处（建议 2-8℃），避免与湿气接触以防止水解。
- 使用建议：在惰性气体（如氮气或氩气）保护下操作，反应溶剂需严格除水。建议佩戴防护手套和护目镜，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。

5. 质量控制与安全信息

- 质量控制：通过 HPLC 和 NMR 确保纯度 >96%，并提供完整的分析证书（COA）。

- 安全信息: 该化合物对眼睛和皮肤有刺激性, 操作时需在通风橱中进行。若不慎接触, 应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物需按有机硼化合物处理规范处置。

本产品仅供科研用途, 不适用于医药或食品领域。使用前请仔细阅读材料安全数据表 (MSDS)。