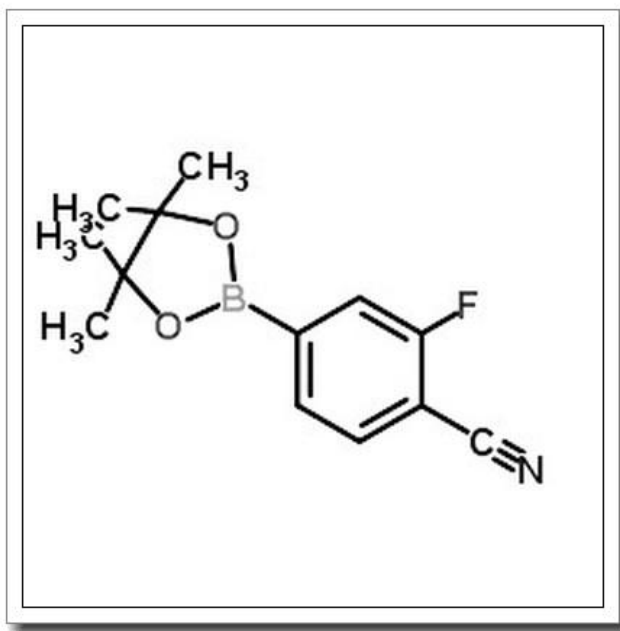


2-氟-4-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二噁硼烷-2-基)苯甲腈

2-fluoro-4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)benzonitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-fluoro-4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)benzonitrile
中文名称	2-氟-4-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二噁硼烷-2-基)苯甲腈
CAS 号	870238-67-8
分子式	C ₁₃ H ₁₅ BFN ₂ O ₂
分子量	247.073
纯度	>96%

产品说明

2-氟-4-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二噁硼烷-2-基)苯甲腈产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称 2-fluoro-4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)benzotrile, CAS 号 870238-67-8, 分子式 C₁₃H₁₅BFN₀₂, 分子量 247.073。其结构中含氟原子、氰基及硼酸酯基团，赋予其独特的化学反应活性。纯度经 HPLC 验证 ≥96%，易溶于常见有机溶剂如二氯甲烷、THF 和乙腈，但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为硼酸酯类衍生物，是 Suzuki-Miyaura 交叉偶联反应的关键中间体，能高效构建碳-碳键。氟原子的引入增强了其电子效应和代谢稳定性，而氰基则提供了进一步官能团化的位点。这些特性使其在药物分子设计和材料科学中具有不可替代的作用。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发领域，广泛用于合成含氟靶向药物，尤其是激酶抑制剂和 PET 显影剂的前体。材料科学中可用于制备有机发光二极管 (OLED) 的硼掺杂材料。此外，在农药化学中作为高效杀虫剂的中间体，以及不对称催化反应的配体修饰组分。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 -20° C 惰性气体 (如氩气) 环境中，避免光照和湿气。开封后需在干燥箱中操作，剩余物料应立即充氮保护。使用时需在通风橱中进行，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试推荐优先使用无水级溶剂。

5. 质量控制与安全信息

批次产品均通过核磁共振 (1H NMR、13C NMR)、质谱 (MS) 和元素分析 (EA) 验证结构。急性毒性数据 (LD50 大鼠口服) >500 mg/kg，属于刺激性化学品。操作时需佩戴护目镜、防尘口罩及丁腈手套。若接触眼睛，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置需符合当地危险化学品管理法规。

本产品仅限科研用途，不适用于诊断或治疗用途。具体技术参数可索取 COA 证书。