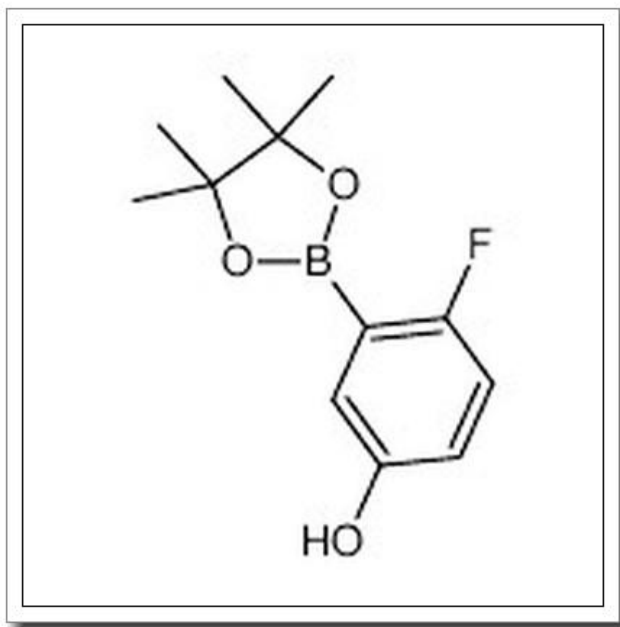


2-氟-5-羟基苯硼酸频那醇酯

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



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-fluoro-3-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)phenol
中文名称	2-氟-5-羟基苯硼酸频那醇酯
CAS 号	1398923-95-9
分子式	C ₁₂ H ₁₆ BF ₃ O ₃
分子量	238.063
纯度	>96%

产品说明

2-氟-5-羟基苯硼酸频那醇酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 4-fluoro-3-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)phenol, 中文名 2-氟-5-羟基苯硼酸频那醇酯, CAS 号 1398923-95-9。分子式为 C₁₂H₁₆BF₃O₃, 分子量 238.063, 纯度 >96%。该化合物为白色至类白色结晶粉末, 属于芳基硼酸酯类衍生物, 具有频那醇酯保护基团, 显著提高其稳定性和溶解性, 适用于惰性气氛或低温条件下的反应。

2. 生物化学功能与重要性

作为硼酸酯类化合物, 其核心功能是通过 Suzuki-Miyaura 偶联反应参与碳-碳键形成, 是药物化学和材料科学中构建复杂芳环结构的关键中间体。氟原子的引入增强了化合物的电子效应和代谢稳定性, 而酚羟基提供了进一步官能团化的位点, 使其在靶向药物设计和荧光探针合成中具有独特价值。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品广泛应用于医药研发、有机合成及材料科学领域。在医药领域, 常用于抗肿瘤药物 (如 PARP 抑制剂) 和中枢神经系统药物的中间体合成。在材料科学中, 可用于制备有机发光二极管 (OLED) 的荧光骨架。此外, 其作为硼酸保护形式, 在多步合成中可避免游离硼酸的自缩合副反应。

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) 保护的干燥环境中, 避免潮湿和光照。使用时需在手套箱或干燥条件下操作, 溶解推荐使用无水 THF 或二氧六环。开封后建议一次性用完, 若需分次使用, 需严格排除氧气并重新充入保护气体密封。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 >96%, 核磁共振 (1H NMR、13C NMR) 和质谱 (MS) 验证结构。安全操作需佩戴防护手套、护目镜及防毒面具, 避免吸入或接触皮肤。若意外接触, 立即用大量清水冲洗并就医。化学废弃物处置需符合当地环保法规。

(注: 本说明基于现有研究数据, 实际应用需结合具体实验条件验证。)