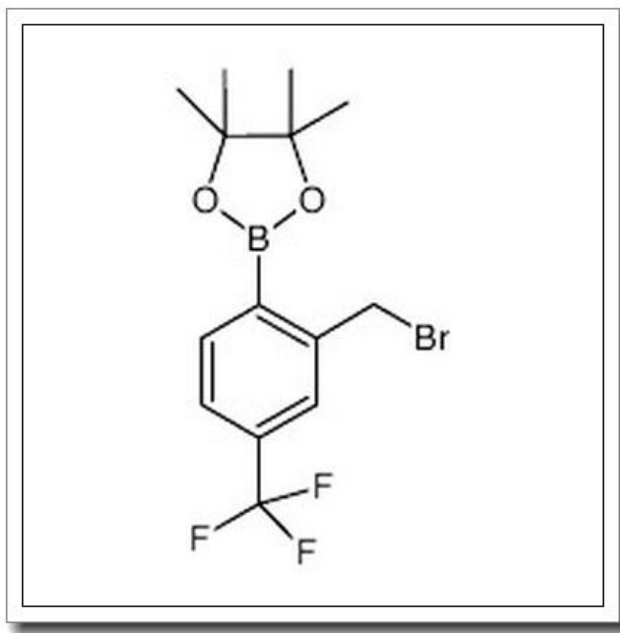


## 2-(2-溴甲基)-4-三氟甲基苯硼酸酯

*2-(bromomethyl)-4-(trifluoromethyl)phenylboronic acid pinacol ester*



### 产品基本信息

属性	值
化学名称	2-(bromomethyl)-4-(trifluoromethyl)phenylboronic acid pinacol ester
中文名称	2-(2-溴甲基)-4-三氟甲基苯硼酸酯
CAS 号	1030832-46-2
分子式	C <sub>14</sub> H <sub>17</sub> BBrF <sub>3</sub> O <sub>2</sub>
分子量	364.994
纯度	>96%

## 产品说明

2-(2-溴甲基)-4-三氟甲基苯硼酸酯 (CAS 号: 1030832-46-2) 是一种重要的有机硼酸酯类化合物, 其分子式为  $C_{14}H_{17}BBrF_3O_2$ , 分子量为 364.994。该化合物以白色至类白色结晶或粉末形式存在, 纯度通常高于 96%, 具有良好的化学稳定性和反应活性。其结构中包含硼酸酯基团和溴甲基官能团, 使其在有机合成中具有广泛的应用价值。

### 1. 产品概述与化学特性

2-(2-溴甲基)-4-三氟甲基苯硼酸酯是一种含硼有机化合物, 兼具硼酸酯的偶联活性和溴甲基的反应性。其硼酸酯部分可通过 Suzuki-Miyaura 偶联反应与芳基卤化物高效结合, 而溴甲基可作为进一步修饰的位点。三氟甲基的引入增强了化合物的疏水性和电子效应, 使其在药物化学和材料科学中具有独特优势。

### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物在生物化学领域主要用于构建复杂分子骨架, 尤其是含三氟甲基的芳环结构。三氟甲基在药物分子中可改善代谢稳定性和生物利用度, 因此该化合物是合成抗癌、抗炎及中枢神经系统药物的重要中间体。此外, 其硼酸酯基团在蛋白质标记和生物共轭化学中也有潜在应用。

### 3. 主要应用领域与具体用途

该产品广泛应用于医药研发、有机合成和材料科学领域。在医药化学中, 它用于构建三氟甲基芳烃类活性分子; 在材料科学中, 可作为功能化单体制备高性能聚合物或液晶材料。具体用途包括 Suzuki 偶联反应、过渡金属催化反应以及作为多官能团砌块参与多步合成。

### 4. 储存条件与使用建议

建议在  $-20^{\circ}C$ 、干燥避光条件下储存, 以保持其稳定性。开封后需充惰性气体 (如氮气) 保护, 避免吸湿和氧化。使用时应在惰性气氛 (如氩气) 下操作, 避免与强氧化剂或强酸接触。溶解时可选用无水四氢呋喃或二甲基亚砜等极性溶剂。

## 5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和 NMR 严格质量控制，确保纯度>96%。使用时需穿戴防护手套、护目镜和实验服，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。若不慎接触，应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应按照有机卤化物相关规定处理，避免环境污染。

该化合物因其多功能性和高反应活性，已成为现代有机合成和药物研发的重要工具，使用者需充分了解其特性并遵循安全操作规程。