

# 3-chloro-2-fluoro-5-(trifluoroMethyl) phenylboronic acid

产品图片未找到

## 产品基本信息

属性	值
化学名称	3-chloro-2-fluoro-5-(trifluoroMethyl) phenylboronic acid
产品目录号	
CAS 号	2096342-38-8
分子式	C7H4BC1F4O2
分子量	242.363
纯度	>96%

## 产品说明

### 3-氯-2-氟-5-(三氟甲基)苯硼酸产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

本品为白色至类白色结晶性粉末，化学名为 3-chloro-2-fluoro-5-(trifluoromethyl)phenylboronic acid, CAS 号 2096342-38-8, 分子式 C<sub>7</sub>H<sub>4</sub>BClF<sub>4</sub>O<sub>2</sub>, 分子量 242.363。纯度经 HPLC 验证 ≥96%，具有硼酸类化合物的典型特性，包括在碱性条件下形成硼酸盐阴离子及与二醇类化合物的可逆酯化反应。其结构中含氯、氟及三氟甲基取代基，赋予其强电子效应和空间位阻，显著影响反应活性。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为芳基硼酸衍生物，本品是 Suzuki-Miyaura 偶联反应的关键中间体，广泛应用于碳-碳键构建。三氟甲基的引入增强了化合物的脂溶性和代谢稳定性，使其在药物化学中成为优化先导化合物的重要修饰基团。氯和氟原子的协同作用可调节分子与靶标蛋白的相互作用，常见于抗炎、抗肿瘤药物的研发。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于医药和材料科学领域。在医药研发中，用于合成含三氟甲基的活性分子，如激酶抑制剂或 G 蛋白偶联受体调节剂。在材料领域，可作为有机电子器件（如 OLED）的前体。此外，在农药化学中用于开发高效低毒含氟农药。

#### 4. 储存条件与使用建议

储存于 -20° C、惰性气体（如氩气）保护的干燥环境中，避免光照及湿气。开封后建议分装使用，剩余部分需重新充氮密封。使用时需在干燥惰性气氛（如手套箱）中操作，若需溶解，推荐使用无水 THF 或 DMSO，并避免接触强氧化剂。

#### 5. 质量控制与安全信息

批次纯度通过 HPLC 和 NMR 双重验证，残留溶剂符合 ICH 标准。本品对眼睛、皮肤及呼吸道有刺激性，操作时需佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩。若不慎接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物需按危险化学品规范处置。

(全文共计 436 字)