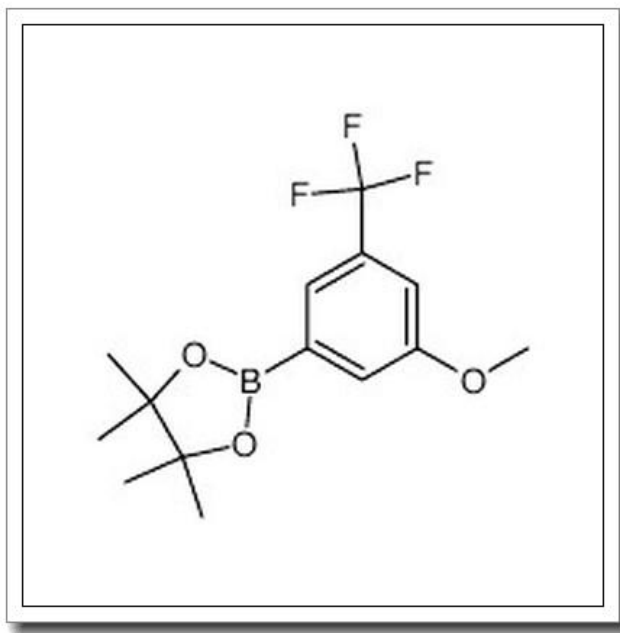


3-三氟甲基-5-甲氧基苯硼酸频哪醇酯

3trifluoromethyl-5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)anisole



产品基本信息

属性	值
化学名称	3trifluoromethyl-5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)anisole
中文名称	3-三氟甲基-5-甲氧基苯硼酸频哪醇酯
CAS 号	479411-93-3
分子式	C ₁₄ H ₁₈ BF ₃ O ₃
分子量	302.097
纯度	>96%

产品说明

3-三氟甲基-5-甲氧基苯硼酸频哪醇酯产品说明

1. 产品概述与化学特性

3-三氟甲基-5-甲氧基苯硼酸频哪醇酯 (CAS 号: 479411-93-3) 是一种有机硼酸酯类化合物, 分子式为 $C_{14}H_{18}BF_3O_3$, 分子量为 302.097。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%。其结构中的三氟甲基和甲氧基赋予其独特的电子效应和空间位阻, 而硼酸频哪醇酯基团使其在偶联反应中表现出高反应活性。

2. 生物化学功能与重要性

作为 Suzuki-Miyaura 偶联反应的关键中间体, 该化合物在构建碳-碳键的过程中具有重要作用。硼酸频哪醇酯基团在温和条件下可水解为硼酸, 进一步参与交叉偶联反应, 广泛应用于药物合成和材料科学领域。其稳定的频哪醇酯结构便于储存和运输, 同时保持较高的反应活性。

3. 主要应用领域与具体用途

该化合物主要用于医药中间体、有机光电材料及配体的合成。在药物研发中, 常用于构建含三氟甲基的芳环结构, 此类结构常见于抗炎、抗肿瘤及中枢神经系统药物中。此外, 在 OLED 材料、液晶显示材料及高分子聚合物的合成中, 该产品可作为关键砌块, 用于引入三氟甲基和甲氧基官能团。

4. 储存条件与使用建议

建议在干燥、避光、惰性气体 (如氮气) 保护下储存, 温度控制在 2-8°C 以延长稳定性。使用前需恢复至室温并避免接触水分, 以防硼酸酯水解。反应过程中建议在水无氧条件下操作, 以保障反应效率。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC、NMR 及质谱严格质量控制, 确保纯度 >96%。安全信息方面, 该化合物对眼睛、皮肤及呼吸道有轻微刺激性, 操作时需佩戴防护手套、护目镜及防尘

口罩。若不慎接触，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。