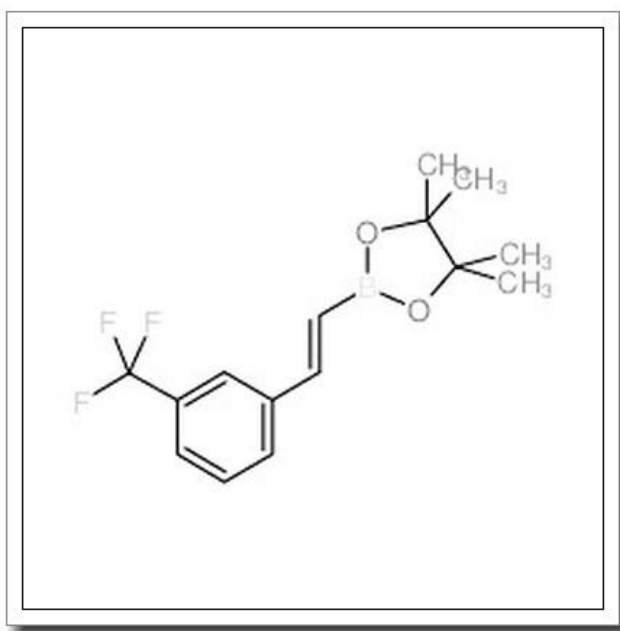


3-三氟甲基-反式-beta-苯乙烯硼酸频那醇酯

E-2-(3-Trifluoromethylphenyl)vinylboronic acid pinacol ester



产品基本信息

属性	值
化学名称	E-2-(3-Trifluoromethylphenyl)vinylboronic acid pinacol ester
中文名称	3-三氟甲基-反式-beta-苯乙烯硼酸频那醇酯
CAS 号	1073354-88-7
分子式	C ₁₅ H ₁₈ BF ₃ O ₂
分子量	298.108
纯度	>96%

产品说明

3-三氟甲基-反式-beta-苯乙烯硼酸频那醇酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3-三氟甲基-反式-beta-苯乙烯硼酸频那醇酯 (E-2-(3-Trifluoromethylphenyl)vinylboronic acid pinacol ester) 是一种高纯度有机硼酸酯化合物，化学式为 $C_{15}H_{18}BF_3O_2$ ，分子量 298.108，CAS 号为 1073354-88-7。该化合物以白色至类白色结晶或粉末形式存在，纯度超过 96%，具有稳定的反式构型。其结构中的三氟甲基和乙烯基硼酸酯基团赋予其独特的电子效应和反应活性，适用于多种偶联反应。

2. 生物化学功能与重要性

作为硼酸酯类衍生物，该化合物在 Suzuki-Miyaura 偶联反应中表现出优异的反应活性，能够与芳基卤化物高效结合形成碳碳键。三氟甲基的引入显著增强了产物的脂溶性和代谢稳定性，使其在药物化学中成为构建含三氟甲基芳环结构的关键中间体。此外，其硼酸酯基团在生理条件下相对稳定，适合用于靶向药物开发和生物正交化学研究。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品广泛应用于医药研发、材料科学和有机合成领域。在药物开发中，常用于合成抗肿瘤、抗炎及中枢神经系统药物的三氟甲基化结构单元。在材料科学中，可作为有机发光二极管 (OLED) 和液晶材料的合成前体。实验室中，它被用于构建复杂分子骨架，特别是需要引入三氟甲基和芳基乙烯基的交叉偶联反应。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 、惰性气体（如氩气）保护下避光保存，长期储存需置于干燥器中。开封后应尽快使用，避免反复冻融和暴露于潮湿环境。使用时需在手套箱或通风橱中操作，避免直接接触空气和水。溶解推荐使用无水四氢呋喃或二甲基亚砜等惰性溶剂，反应体系需严格除氧。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC、NMR 和质谱进行严格质量控制，确保批次间一致性。安全数据表明，该化合物可能对眼睛和皮肤有刺激性，操作时应佩戴防护手套、护目镜及实验服。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处理规范处置，避免释放至环境中。

（注：本说明基于现有实验数据编制，具体应用需结合用户实验条件优化。）