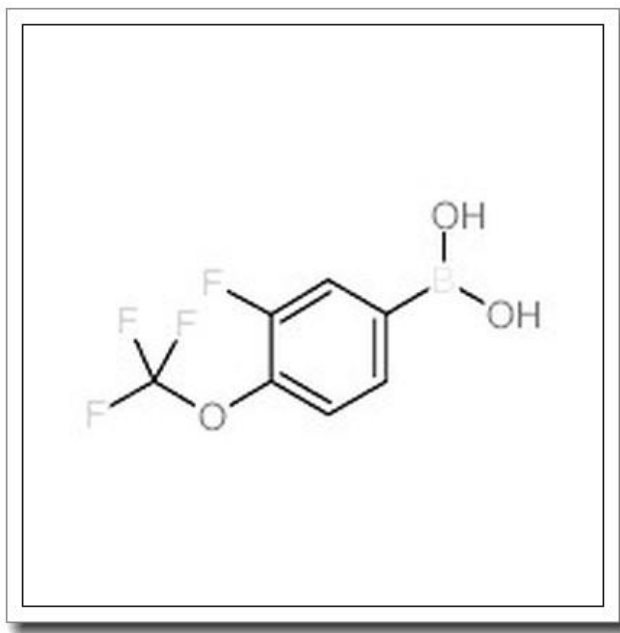


3-氟-4-(三氟甲氧基)苯硼酸

[3-fluoro-4-(trifluoromethoxy)phenyl]boronic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	[3-fluoro-4-(trifluoromethoxy)phenyl]boronic acid
中文名称	3-氟-4-(三氟甲氧基)苯硼酸
CAS 号	187804-79-1
分子式	C7H5BF4O3
分子量	223.917
纯度	>96%

产品说明

3-氟-4-(三氟甲氧基)苯硼酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3-氟-4-(三氟甲氧基)苯硼酸 (英文名称: [3-fluoro-4-(trifluoromethoxy)phenyl]boronic acid) 是一种有机硼酸类化合物, CAS 号为 187804-79-1, 分子式为 $C_7H_5BF_4O_3$, 分子量为 223.917。该化合物纯度高于 96%, 外观通常为白色至类白色结晶或粉末。其结构中的硼酸基团 ($-B(OH)_2$) 和芳香环上的氟原子及三氟甲氧基 ($-OCF_3$) 赋予其独特的反应活性, 使其在有机合成和药物化学中具有重要价值。

2. 生物化学功能与重要性

作为硼酸类化合物, 该产品在 Suzuki-Miyaura 偶联反应中表现出优异的催化活性, 能够高效构建碳-碳键。氟原子和三氟甲氧基的引入增强了化合物的脂溶性和代谢稳定性, 使其在药物分子设计中备受关注。此外, 硼酸基团还可与生物分子中的羟基或氨基发生特异性结合, 因此在化学生物学和探针开发中具有潜在应用。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于医药中间体合成、材料科学和农药研发领域。在药物化学中, 它是构建含氟芳环结构的关键砌块, 常用于抗肿瘤、抗病毒及中枢神经系统药物的开发。在材料科学中, 可用于制备含氟聚合物或液晶材料。此外, 其作为有机合成试剂, 还可用于复杂天然产物的全合成。

4. 储存条件与使用建议

建议在干燥、避光条件下储存, 温度保持在 $2-8^{\circ}C$, 长期储存需充入惰性气体 (如氮气) 保护。开封后应尽快使用, 避免反复暴露于空气中。使用时需在惰性气氛 (如氩气) 下操作, 以防止硼酸基团水解。溶解性测试表明, 该化合物易溶于极性有机溶剂 (如 DMF、DMSO), 微溶于水。

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, 确保纯度 $\geq 96\%$ 。安全数据表

明，该化合物对眼睛、皮肤和呼吸道有刺激性，操作时应佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩。若不慎接触，需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地化学品管理法规，避免直接排放至环境中。

（注：以上信息基于实验室测试数据，实际应用需结合具体实验条件验证。）