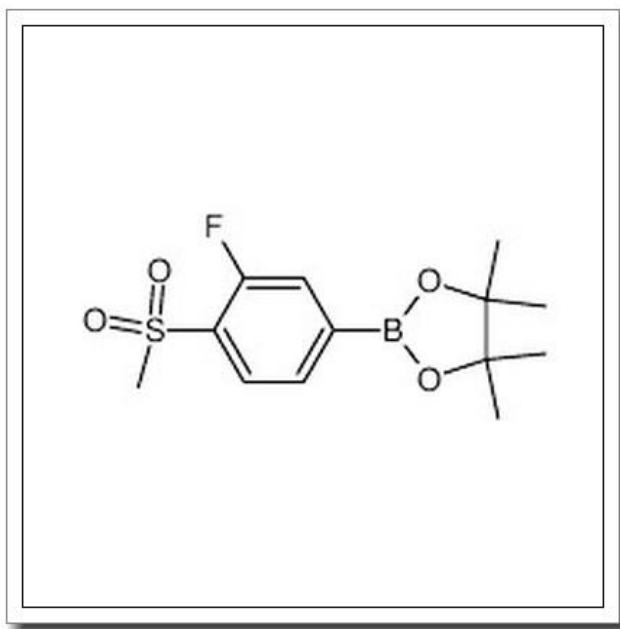


3-氟-4-甲磺基苯硼酸频哪醇酯

2-(3-fluoro-4-methanesulfonyl-phenyl)-4,4,5,5-tetramethyl-[1,3,2]dioxaborolane



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-(3-fluoro-4-methanesulfonyl-phenyl)-4,4,5,5-tetramethyl-[1,3,2]dioxaborolane
中文名称	3-氟-4-甲磺基苯硼酸频哪醇酯
CAS 号	648904-85-2
分子式	C ₁₃ H ₁₈ BF ₀ S ₄
分子量	300.154
纯度	>96%

产品说明

3-氟-4-甲磺基苯硼酸频哪醇酯产品说明

1. 产品概述与化学特性

3-氟-4-甲磺基苯硼酸频哪醇酯（英文名称：2-(3-fluoro-4-methanesulfonyl-phenyl)-4,4,5,5-tetramethyl-[1,3,2]dioxaborolane）是一种有机硼酸酯类化合物，CAS 号为 648904-85-2，分子式为 C₁₃H₁₈BF₀₄S，分子量为 300.154。该化合物为白色至类白色结晶或粉末，纯度通常高于 96%。其结构中的硼酸频哪醇酯基团和甲磺基（-SO₂CH₃）使其在有机合成中具有较高的反应活性，尤其是作为 Suzuki-Miyaura 偶联反应的关键中间体。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物在生物化学和药物化学领域具有重要意义。硼酸酯基团使其能够与卤代芳烃发生高效的交叉偶联反应，广泛应用于碳-碳键的形成。氟原子的引入增强了化合物的电子效应和代谢稳定性，而甲磺基则可能参与氢键相互作用，提高分子与靶标的结合能力。这些特性使其成为药物研发中构建复杂分子骨架的重要砌块。

3. 主要应用领域与具体用途

3-氟-4-甲磺基苯硼酸频哪醇酯主要用于以下领域：

- 药物研发：作为中间体用于合成含氟和磺基的活性药物分子，如激酶抑制剂和抗炎药物。
- 材料科学：用于制备有机光电材料和高分子聚合物。
- 化学合成：在 Suzuki-Miyaura 偶联反应中作为硼酸酯试剂，高效构建联芳基结构。

4. 储存条件与使用建议

该化合物应密封保存于干燥、避光的环境中，推荐储存温度为 2-8° C，长期储存建议充入惰性气体（如氮气）保护。使用时需在干燥惰性气氛（如氩气或氮气）下操作，避免接触水分和强氧化剂。溶解时可选用无水乙醇、二甲基亚砷（DMSO）等有机溶剂。

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%。安全信息如下：

- 避免吸入、接触皮肤或眼睛，操作时需佩戴防护手套、护目镜和防尘口罩。
- 如不慎接触，立即用大量清水冲洗，并就医处理。
- 废弃物应按照当地法规处置，不可随意丢弃。

本产品仅供科研用途，不适用于医药、食品或家庭使用。