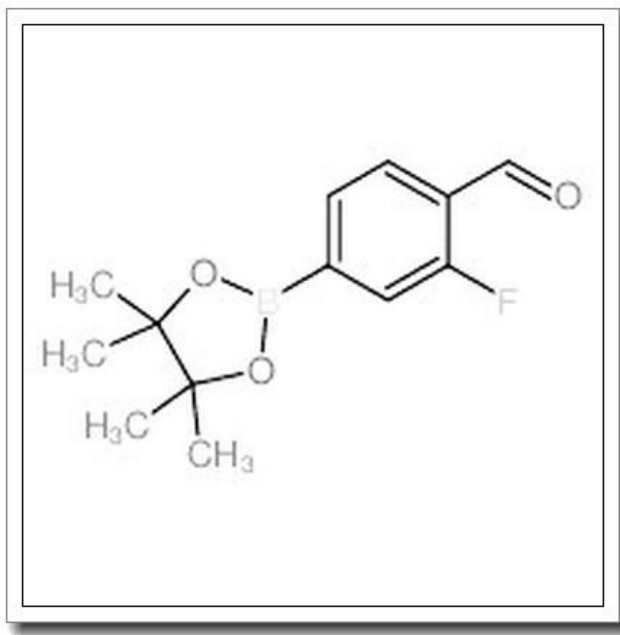


## 3-氟-4-甲酰基苯硼酸频那醇酯

*3-Fluoro-4-formylphenylboronic acid pinacol ester*



### 产品基本信息

属性	值
化学名称	3-Fluoro-4-formylphenylboronic acid pinacol ester
中文名称	3-氟-4-甲酰基苯硼酸频那醇酯
CAS 号	503176-50-9
分子式	C <sub>13</sub> H <sub>16</sub> BF <sub>03</sub>
分子量	250.074
纯度	>96%

## 产品说明

### 3-氟-4-甲酰基苯硼酸频那醇酯产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

3-氟-4-甲酰基苯硼酸频那醇酯 (CAS 号 503176-50-9) 是一种重要的有机硼酸酯衍生物, 分子式为  $C_{13}H_{16}BF_3O_3$ , 分子量 250.074。该化合物以白色至类白色结晶或粉末形式存在, 纯度高于 96%, 兼具苯硼酸酯的稳定性和醛基的反应活性。其结构中包含的氟原子增强了电子效应, 而频那醇酯基团显著提高了其空气和湿度稳定性, 使其更适用于需温和反应条件的合成应用。

#### 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, 该化合物通过硼酸酯基团与芳基卤化物的钯催化交叉偶联, 高效构建碳-碳键。醛基的存在进一步扩展了其功能化潜力, 可参与缩合、还原胺化等反应, 在药物分子修饰和材料科学中具有独特价值。其氟原子的引入可调节脂溶性和靶标结合能力, 常见于抗癌、抗炎等活性分子的结构优化中。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本产品广泛应用于医药研发、材料科学及有机合成领域。在药物化学中, 常用于构建酪氨酸激酶抑制剂和 G 蛋白偶联受体调节剂的芳基骨架; 在材料领域, 可作为共轭聚合物合成的关键单体, 改善光电性能。具体实验包括但不限于: 多步合成中的保护-脱保护策略、金属有机框架 (MOFs) 的功能化修饰, 以及荧光探针的醛基衍生化反应。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议在惰性气体 (如氩气) 保护下密封保存, 长期储存温度应低于  $-20^{\circ}C$ , 短期使用可置于  $2-8^{\circ}C$  干燥环境。开封前需恢复至室温以避免结露。实验操作需在干燥惰性氛围 (如手套箱) 中进行, 若接触空气, 建议通过薄层色谱 (TLC) 监测纯度变化。溶解推荐使用无水 THF 或二氯甲烷, 避免使用质子性溶剂。

## 5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 验证纯度 $\geq 96\%$ ，MS 和 NMR 确保结构准确性。安全数据表明其对呼吸道和皮肤有潜在刺激性，操作时应佩戴护目镜、防尘口罩及丁腈手套。若不慎接触，立即用大量清水冲洗 15 分钟并就医。废弃物需按危险有机硼化合物处理，禁止直接排放至下水道。

(全文共计 452 字)