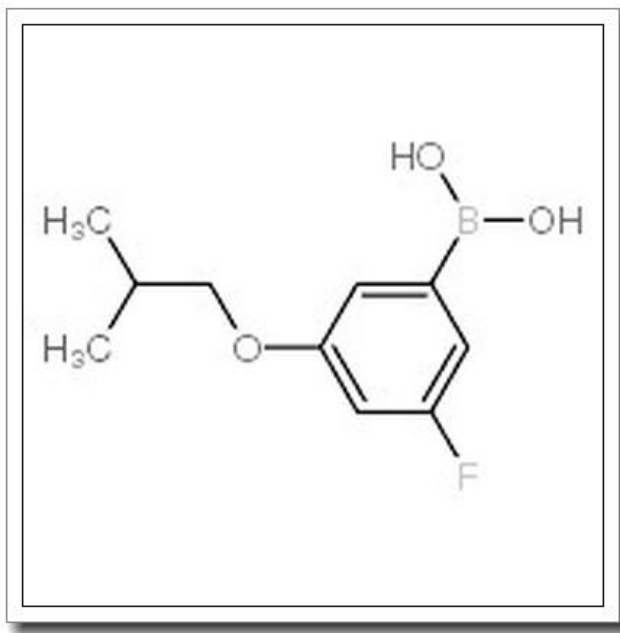


## 3-氟-5-异丁氧基苯硼酸

*3-Fluoro-5-isobutoxyphenylboronic acid*



### 产品基本信息

属性	值
化学名称	3-Fluoro-5-isobutoxyphenylboronic acid
中文名称	3-氟-5-异丁氧基苯硼酸
CAS 号	850589-57-0
分子式	C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> BF <sub>3</sub>
分子量	212.026
纯度	>96%

## 产品说明

### 3-氟-5-异丁氧基苯硼酸产品说明

#### 1. 产品概述与化学特性

3-氟-5-异丁氧基苯硼酸（英文名称：3-Fluoro-5-isobutoxyphenylboronic acid）是一种有机硼酸类化合物，CAS 号为 850589-57-0，分子式为  $C_{10}H_{14}BF_3O_3$ ，分子量为 212.026。该化合物为白色至类白色固体，纯度通常高于 96%。其结构中的硼酸基团和氟取代基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

作为苯硼酸衍生物，3-氟-5-异丁氧基苯硼酸可通过 Suzuki-Miyaura 偶联反应与卤代芳烃或烯烃发生交叉偶联，形成碳-碳键。氟原子的引入增强了化合物的电子效应和代谢稳定性，使其在药物分子设计中尤为有用。此外，异丁氧基的位阻效应可调节反应选择性，适用于复杂分子的构建。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

该化合物广泛应用于医药研发、材料科学和有机合成领域。在药物化学中，它常用于合成含氟杂环或芳基结构的目标分子，尤其是抗肿瘤和抗炎药物的中间体。在材料科学中，可用于制备功能化聚合物或液晶材料。此外，它还作为探针或标记物用于生化研究。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议在 2-8°C 的干燥环境中避光保存，长期储存需置于惰性气体（如氩气）保护下。使用时需在干燥条件下操作，避免接触水分或强氧化剂。溶解时可选用四氢呋喃、二甲基亚砜等有机溶剂，并确保反应体系无水无氧以提高反应效率。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和 NMR 严格检测，确保纯度 >96%。使用时需穿戴防护装备（如手套、护目镜和实验服），避免吸入粉尘或直接接触皮肤。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规范处理，遵守当地环保法规。

以上信息仅供参考，具体应用需结合实验条件进一步优化。