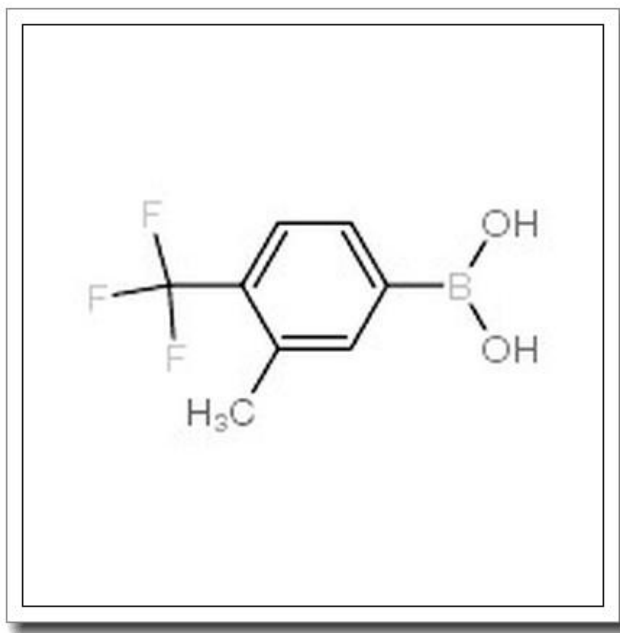


3-甲基-4-(三氟甲基)苯硼酸

[3-methyl-4-(trifluoromethyl)phenyl]boronic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	[3-methyl-4-(trifluoromethyl)phenyl]boronic acid
中文名称	3-甲基-4-(三氟甲基)苯硼酸
CAS 号	864759-67-1
分子式	C ₈ H ₈ BF ₃ O ₂
分子量	203.954
纯度	>96%

产品说明

3-甲基-4-(三氟甲基)苯硼酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3-甲基-4-(三氟甲基)苯硼酸 (英文名称: [3-methyl-4-(trifluoromethyl)phenyl]boronic acid) 是一种有机硼化合物, CAS 号为 864759-67-1, 分子式为 $C_8H_8BF_3O_2$, 分子量为 203.954。本品为白色至类白色结晶性粉末, 纯度大于 96%。其结构中的硼酸基团 ($-B(OH)_2$) 和三氟甲基 ($-CF_3$) 赋予其独特的反应活性, 使其在有机合成中具有重要价值。该化合物在常温下稳定, 但需避免与强氧化剂接触。

2. 生物化学功能与重要性

作为苯硼酸衍生物, 本品可通过 Suzuki-Miyaura 偶联反应与卤代烃或芳基 triflate 等底物形成碳-碳键, 广泛应用于药物中间体和功能材料的合成。三氟甲基的引入显著增强了化合物的脂溶性和代谢稳定性, 使其在医药化学中成为优化先导化合物的重要结构单元。此外, 硼酸基团的配位能力也使其可用于传感器和催化剂的开发。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于以下领域: 医药研发中作为关键中间体, 用于合成含三氟甲基的靶向药物; 材料科学中用于制备有机电致发光材料 (OLED) 和液晶材料; 农业化学中用于开发高效低毒的农药。具体用途包括但不限于抗肿瘤药物、抗炎药物的结构修饰, 以及高性能聚合物的单体合成。

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, 长期储存需充入惰性气体 (如氮气)。开封后应尽快使用, 避免反复冻融或暴露于潮湿环境。使用时需在惰性气氛 (如氩气) 下操作, 推荐以无水溶剂 (如 THF、DMSO) 溶解。实验人员应佩戴防护手套、护目镜, 并在通风橱中处理本品。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，并提供完整的 COA（质量分析证书）。安全数据表明，本品对眼睛和皮肤有刺激性，吸入或误食可能造成危害。应急处理措施包括：接触皮肤时立即用大量清水冲洗，吸入时转移至空气新鲜处，必要时就医。废弃物应按照危险化学品规范处置，避免环境污染。

（注：本说明基于现有研究数据，实际应用前请查阅最新文献并评估具体实验条件。）