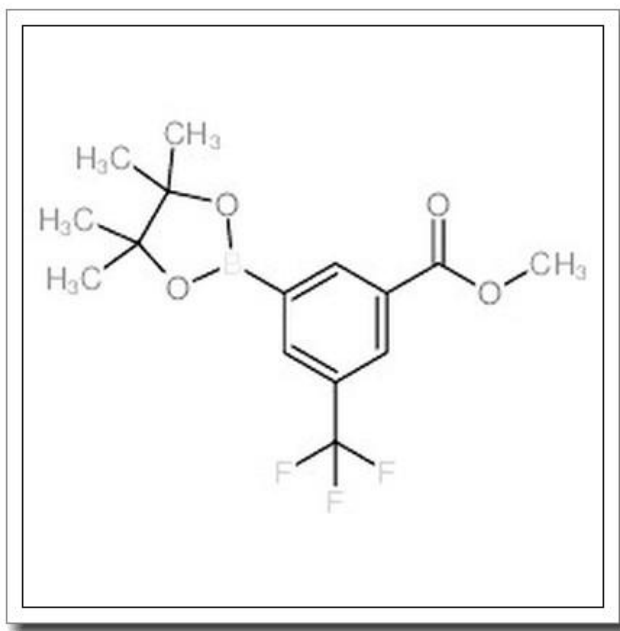


3-(甲氧基羰基)-5-三氟甲基苯硼酸频那醇酯

3-(Methoxycarbonyl)-5-trifluoromethylphenylboronic acid, pinacol ester



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-(Methoxycarbonyl)-5-trifluoromethylphenylboronic acid, pinacol ester
中文名称	3-(甲氧基羰基)-5-三氟甲基苯硼酸频那醇酯
CAS 号	1150271-61-6
分子式	C ₁₅ H ₁₈ BF ₃ O ₄
分子量	330.107
纯度	>96%

产品说明

3-(甲氧基羰基)-5-三氟甲基苯硼酸频那醇酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 3-(Methoxycarbonyl)-5-trifluoromethylphenylboronic acid, pinacol ester, 是一种含硼有机化合物, CAS 号为 1150271-61-6。其分子式为 C₁₅H₁₈BF₃O₄, 分子量为 330.107, 纯度经高效液相色谱 (HPLC) 分析确认大于 96%。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 具有典型的硼酸酯类结构特征, 其中频那醇酯基团增强了其稳定性和溶解性, 而三氟甲基和甲氧羰基的引入赋予其独特的电子效应和空间位阻。

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, 该硼酸酯在碳-碳键形成中表现出高反应活性和选择性。三氟甲基的强吸电子特性可显著调节芳环电子云密度, 使其在构建含氟药物分子骨架时具有不可替代的作用。其稳定性优于游离硼酸, 在含水反应体系中仍能保持活性, 是医药研发和材料科学中的重要合成砌块。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要应用于以下领域:

- 医药化学: 用于合成含三氟甲基的靶向药物分子, 特别是在抗肿瘤和抗炎药物开发中
- 材料科学: 作为有机电致发光材料 (OLED) 的前体化合物
- 农药化学: 构建具有生物活性的含氟农药分子
- 学术研究: 用于开发新型过渡金属催化反应体系

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, 储存温度应控制在 -20° C 至 4° C 范围内。开封后需在干燥环境中迅速分装, 避免反复冻融。使用时需在手套箱或干燥环境下操作, 建议用无水 THF 或 DMSO 作为溶剂体系。与钯催化剂配伍时, 需严格除氧处理反应体系。

5. 质量控制与安全信息

本产品经核磁共振（ ^1H NMR、 ^{13}C NMR、 ^{19}F NMR）和质谱（MS）验证结构，HPLC 检测显示单一主峰。安全数据表明该化合物对眼睛和呼吸道有刺激性，操作时应佩戴防护眼镜和防尘口罩。若不慎接触皮肤，应立即用大量清水冲洗。废弃物处理需符合危险化学品处置规范，建议通过专业化学品回收公司处理。

（注：本说明基于现有研究数据编制，具体应用需结合实验条件优化。产品规格可能因批次略有差异，请以随货质检报告为准。）