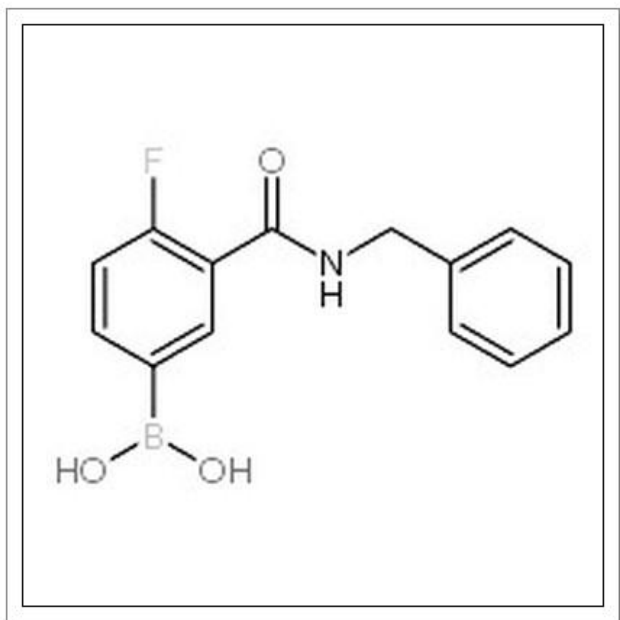


3-(苄基氨甲酰基)-4-氟苯基硼酸

3-(Benzylcarbamoyl)-4-fluorophenylboronic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-(Benzylcarbamoyl)-4-fluorophenylboronic acid
中文名称	3-(苄基氨甲酰基)-4-氟苯基硼酸
CAS 号	874219-22-4
分子式	C ₁₄ H ₁₃ BFN ₃ O ₃
分子量	273.067
纯度	>96%

产品说明

3-(苄基氨甲酰基)-4-氟苯基硼酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3-(Benzylcarbamoyl)-4-fluorophenylboronic acid (CAS 号: 874219-22-4) 是一种含氟苯硼酸衍生物, 分子式为 $C_{14}H_{13}BFN_2O_3$, 分子量 273.067。该化合物以白色至类白色结晶粉末形式存在, 纯度高于 96%, 兼具硼酸的配位能力与酰胺基团的反应活性。其结构中氟原子的引入增强了电子效应, 而苄基氨甲酰基赋予其独特的空间位阻特性, 适用于选择性偶联反应。

2. 生物化学功能与重要性

作为硼酸类化合物, 该产品可通过硼原子与二醇或氨基的可逆结合参与 Suzuki-Miyaura 交叉偶联反应, 是构建碳-碳键的关键中间体。氟原子的存在可调节分子亲脂性及靶标结合能力, 在药物设计中常用于优化代谢稳定性。其酰胺基团进一步扩展了与生物大分子 (如蛋白酶) 的相互作用潜力, 在抑制剂开发中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

该试剂广泛应用于医药研发与材料科学领域:

- (1) 医药中间体: 用于合成含氟靶向药物, 尤其是酪氨酸激酶抑制剂及抗菌化合物;
- (2) 有机发光材料: 作为电子传输层前体, 用于 OLED 器件开发;
- (3) 生物探针: 通过硼酸-二醇特异性结合, 用于糖类化合物的标记与检测;
- (4) 不对称催化: 作为手性配体组分参与过渡金属催化反应。

4. 储存条件与使用建议

建议在惰性气体保护下密封储存, 温度控制在 2-8°C, 避免光照及湿气。使用时需在干燥环境下操作, 推荐以无水 DMSO 或 THF 溶解。长期保存建议分装充氩处理, 开封后需重新检测纯度。与强氧化剂、酸性物质需隔离存放。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 验证纯度 >96%，残留溶剂符合 ICH 标准。安全数据表明其具有刺激性，操作时需佩戴防护手套及护目镜，避免吸入粉尘。如接触皮肤，立即用大量清水冲洗。废弃物应作为有害化学品处理，遵守当地环保法规。

（注：实际应用前请查阅最新材料安全数据表（MSDS）并开展小规模预实验验证适用性。）