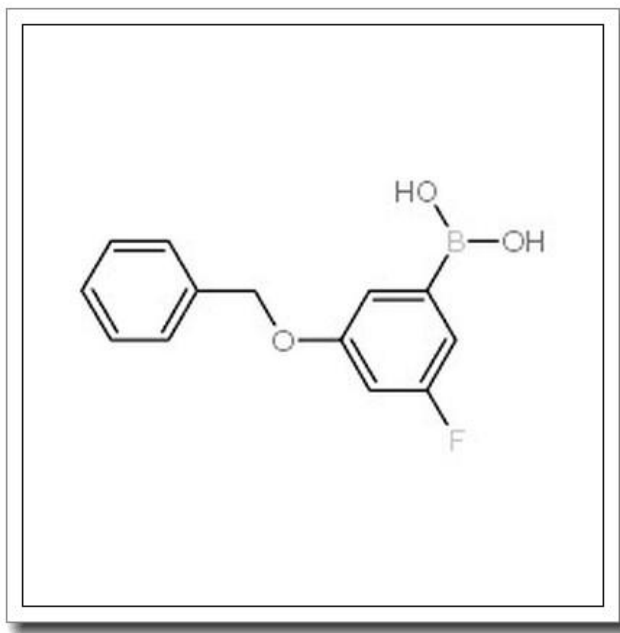


3-苄氧基-5-氟苯硼酸

3-Benzyloxy-5-fluorophenylboronic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-Benzyloxy-5-fluorophenylboronic acid
中文名称	3-苄氧基-5-氟苯硼酸
CAS 号	850589-56-9
分子式	C13H12BF03
分子量	246.042
纯度	>96%

产品说明

3-苄氧基-5-氟苯硼酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3-苄氧基-5-氟苯硼酸 (3-Benzyloxy-5-fluorophenylboronic acid) 是一种有机硼酸衍生物，化学式为 $C_{13}H_{12}BF_3O_3$ ，分子量为 246.042，CAS 号为 850589-56-9。该化合物为白色至类白色结晶粉末，纯度 >96%，具有硼酸基团 ($-B(OH)_2$) 和苄氧基 ($-OCH_2Ph$) 的典型反应活性。其结构中氟原子的引入增强了电子效应，使其在偶联反应中表现出较高的选择性。

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，该化合物能够高效参与碳-碳键形成反应，广泛应用于药物化学和材料科学领域。硼酸基团与芳基卤化物的钯催化交叉偶联特性，使其成为构建复杂芳环体系的重要工具。氟原子的存在进一步提升了其生物活性，尤其在靶向药物设计中可调节分子的脂溶性和代谢稳定性。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于以下领域：

- (1) 药物研发：作为抗肿瘤、抗感染药物合成的中间体，例如用于激酶抑制剂或氟代芳香族药物的构建。
- (2) 材料科学：参与制备有机发光二极管 (OLED) 中的荧光材料或导电聚合物。
- (3) 化学研究：用于开发新型硼酸类催化剂或功能化分子探针。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 、避光、干燥条件下密封保存，避免与强氧化剂或潮湿环境接触。使用时需在惰性气体（如氮气）保护下操作，溶解性测试表明其易溶于四氢呋喃 (THF) 和二甲基亚砜 (DMSO)，水溶性较低。反应体系中建议添加适量碱（如碳酸钾）以促进硼酸基团的活化。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 >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、护目镜，并在通风橱中进行。若接触皮肤或眼睛，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需遵守当地化学品管理法规。

（注：本说明基于现有实验数据编制，具体应用需结合用户实验条件优化。）