

3trifluoromethyl-5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)anisole

产品图片未找到

产品基本信息

属性	值
化学名称	3trifluoromethyl-5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)anisole
产品目录号	
CAS 号	479411-93-3
分子式	C ₁₄ H ₁₈ BF ₃ O ₃
分子量	302.097
纯度	>96%

产品说明

3-三氟甲基-5-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼杂环戊烷-2-基)苯甲醚产品说明书

产品概述与化学特性

本品化学名称为 3-三氟甲基-5-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼杂环戊烷-2-基)苯甲醚, CAS 号为 479411-93-3, 分子式为 C₁₄H₁₈BF₃O₃, 分子量 302.097。该化合物为含硼有机中间体, 常温下呈白色至类白色结晶粉末, 纯度>96%。其结构中的三氟甲基和二氧硼杂环戊烷基团赋予其独特的电子效应与空间位阻特性, 适用于过渡金属催化反应。

生物化学功能与重要性

作为硼酸酯类衍生物, 该产品在 Suzuki-Miyaura 偶联反应中表现出高反应活性, 能高效构建碳-碳键。三氟甲基的强吸电子性可调节芳环电子密度, 显著影响偶联产物的生物活性与物理化学性质, 在药物分子设计中具有重要价值。

主要应用领域与具体用途

1. 医药研发: 用于合成含三氟甲基的靶向药物分子, 尤其是抗肿瘤与抗炎化合物
2. 材料科学: 作为有机电致发光材料 (OLED) 的关键中间体
3. 农药化学: 参与构建具有特定生物活性的农用化学品骨架
4. 学术研究: 在金属有机化学领域作为模型底物研究偶联反应机理

储存条件与使用建议

储存于-20℃惰性气体 (如氩气) 保护的干燥环境中, 避免与湿气接触。开封后建议一次性使用完毕, 或分装后充氮密封保存。使用前需在干燥箱中恢复至室温, 反应体系中需严格除氧除水。

质量控制与安全信息

通过 HPLC、NMR 和质谱进行批次纯度验证, 重金属残留<10ppm。该化合物对眼睛和呼吸道有刺激性, 操作时应佩戴护目镜、防毒面具及丁腈手套。若不慎接触, 立即用大量清水冲洗 15 分钟并就医。废弃物需按危险化学品规范处置。