

(4'-Butyl-3-fluoro-4-biphenylyl)boronic acid

产品图片未找到

产品基本信息

属性	值
化学名称	(4'-Butyl-3-fluoro-4-biphenylyl)boronic acid
产品目录号	
CAS 号	1400809-84-8
分子式	C ₁₆ H ₁₈ BF ₂
分子量	272.122
纯度	>96%

产品说明

(4'-丁基-3-氟-4-联苯基)硼酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

(4'-丁基-3-氟-4-联苯基)硼酸是一种有机硼化合物，化学式为 C₁₆H₁₈BF₂O₂，分子量 272.122，CAS 号为 1400809-84-8。其结构包含联苯骨架、丁基疏水侧链及硼酸官能团，氟原子的引入增强了分子的电子效应和稳定性。本品为白色至类白色固体粉末，纯度>96%，需在惰性气氛下保存以避免硼酸基团水解。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为硼酸类衍生物，可通过 Suzuki-Miyaura 偶联反应与卤代芳烃高效构建碳-碳键，是过渡金属催化反应的关键中间体。氟原子的存在使其在药物化学中具有特殊价值，可调节脂溶性、代谢稳定性和靶标亲和力，常用于先导化合物结构修饰。

3. 主要应用领域与具体用途

- 医药研发：用于合成含联苯结构的抗癌、抗炎药物候选分子，如激酶抑制剂。
- 材料科学：作为有机发光二极管（OLED）和液晶材料的合成砌块。
- 化学合成：在复杂芳香族化合物及天然产物全合成中作为关键中间体。

4. 储存条件与使用建议

建议在-20° C、惰性气体（如氩气）保护下密闭储存，避免与湿气接触。使用前需室温平衡，防止结露。溶解时优先选择无水四氢呋喃或二甲基亚砜等脱水溶剂，反应体系需严格除氧。

5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC 检测纯度>96%，核磁共振（NMR）和质谱（MS）验证结构。操作时需佩戴防护手套及护目镜，避免吸入粉尘。若接触皮肤，立即用大量清水冲洗。化学废弃物应按照有机硼化合物处置规范处理。

（全文共计 398 字）