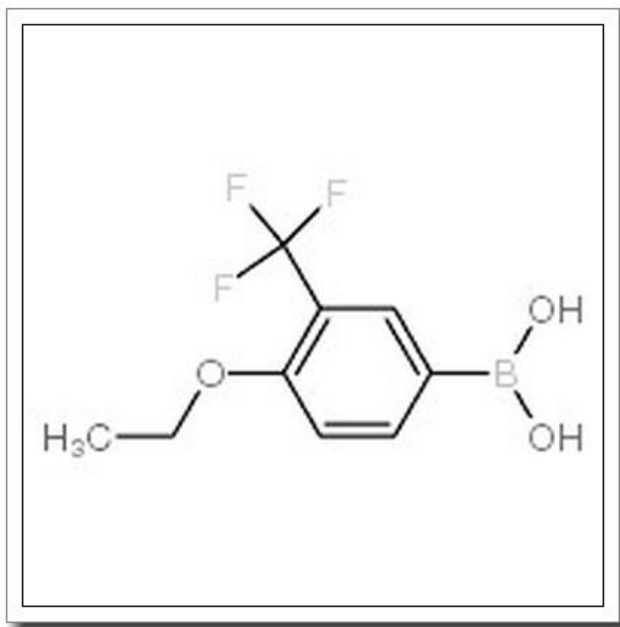


4-乙氧基-2-(三氟甲基)苯硼酸

4-Ethoxy-2-(trifluoromethyl)phenylboronic acid



产品基本信息

| 属性 | 值 |
|-------|---|
| 化学名称 | 4-Ethoxy-2-(trifluoromethyl)phenylboronic acid |
| 中文名称 | 4-乙氧基-2-(三氟甲基)苯硼酸 |
| CAS 号 | 313545-39-0 |
| 分子式 | C ₉ H ₁₀ BF ₃ O ₃ |
| 分子量 | 233.98 |
| 纯度 | >96% |

产品说明

4-乙氧基-2-(三氟甲基)苯硼酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

4-乙氧基-2-(三氟甲基)苯硼酸 (CAS 号: 313545-39-0) 是一种含硼有机化合物, 分子式为 $C_9H_{10}BF_3O_3$, 分子量 233.98。该化合物以白色至类白色结晶粉末形式存在, 纯度 >96%, 具有苯硼酸衍生物的典型特性, 包括良好的热稳定性和适度的极性。其结构中乙氧基和三氟甲基的引入增强了电子效应, 使其在偶联反应中表现出较高的反应活性。

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 Suzuki-Miyaura 偶联反应与卤代芳烃形成碳-碳键, 是构建复杂有机分子的关键中间体。三氟甲基的强吸电子性可调节分子电子云密度, 而乙氧基则提供空间位阻效应, 两者协同作用使其在药物化学和材料科学中具有独特价值。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品广泛应用于医药研发、有机合成及材料科学领域。在医药领域, 用于合成含三氟甲基的靶向药物分子 (如激酶抑制剂); 在材料科学中, 可作为液晶材料或有机光电材料的合成前体。其典型应用包括:

- Suzuki 偶联反应中作为硼酸酯化试剂
- 构建含三氟甲基的芳香族化合物
- 功能性高分子材料的改性单体

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 2-8°C, 避免光照及潮湿环境。开封后需充氮气保护并尽快使用。使用时需在干燥环境下操作, 建议搭配钯催化剂体系 (如 $Pd(PPh_3)_4$) 进行偶联反应。溶解性测试表明, 该产品易溶于 THF、DMSO 等极性有机溶剂, 微溶于水。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度>96%，残留溶剂符合 USP 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。若不慎接触皮肤，应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：本说明基于现有实验数据编制，具体应用需结合用户工艺条件验证。）