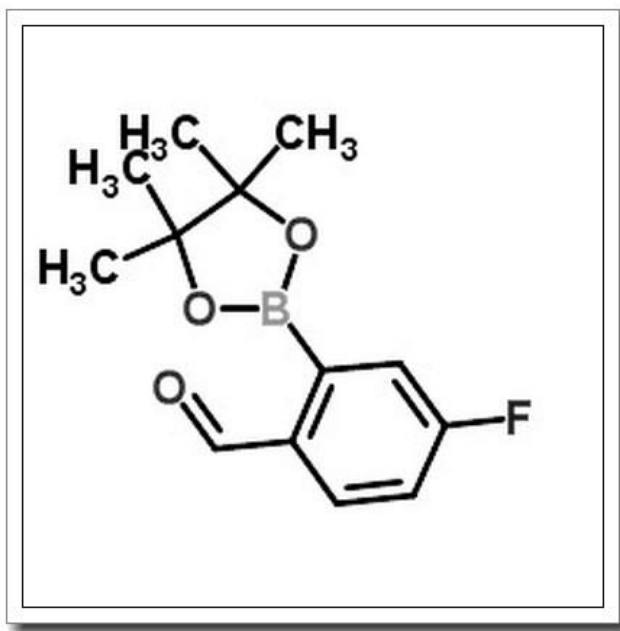


# 4-氟-2-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼戊烷-2-基)苯甲醛

*4-Fluoro-2-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)benzaldehyde*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	4-Fluoro-2-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)benzaldehyde
中文名称	4-氟-2-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼戊烷-2-基)苯甲醛
CAS 号	1844839-22-0
分子式	C <sub>13</sub> H <sub>16</sub> BF <sub>3</sub> O
分子量	250.074
纯度	>96%

## 产品说明

### 4-氟-2-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼戊烷-2-基)苯甲醛产品说明

#### 1. 产品概述与化学特性

本产品是一种含氟芳香硼酸酯衍生物，化学名称为 4-氟-2-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼戊烷-2-基)苯甲醛，CAS 号为 1844839-22-0。其分子式为  $C_{13}H_{16}BF_3$ ，分子量为 250.074，纯度高于 96%。该化合物在常温下为白色至类白色结晶粉末，具有硼酸酯基团的典型稳定性，同时兼具醛基的反应活性。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优异的反应选择性。

#### 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，该化合物可通过硼酸酯基团与卤代芳烃发生交叉偶联，广泛应用于复杂芳香体系的构建。醛基的存在进一步拓展了其合成应用，可通过缩合、还原或氧化反应衍生为醇、羧酸或亚胺类化合物。在药物化学领域，含氟芳环结构可显著改善分子的代谢稳定性和膜穿透性，因此该产品是研发抗肿瘤、抗炎及中枢神经系统药物的重要砌块。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于医药中间体合成，特别适用于构建含氟芳香族靶标分子。在材料科学中，可作为有机发光二极管 (OLED) 和液晶材料的前体。具体应用包括：帕金森病治疗药物候选分子的合成、氟代荧光探针的制备，以及作为金属有机框架 (MOF) 材料的修饰配体。实验室级应用涵盖过渡金属催化反应优化、同位素标记化合物合成等研究场景。

#### 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  $-20^{\circ}C$  至  $4^{\circ}C$  范围内，避免光照和湿度。开封后需在干燥箱中操作，建议分装使用以减少反复冻融。使用前需通过核磁共振 (NMR) 或高效液相色谱 (HPLC) 验证纯度。反应体系中建议加入分子筛以消除水分干扰，偶联反应适宜在 pH 7-9 的缓冲体系中进行。

## 5. 质量控制与安全信息

本产品经质谱 (MS) 和元素分析 (EA) 双重验证, 批次间纯度偏差小于 1%。危险类别为刺激性化学品, 操作时应佩戴护目镜和防化手套, 避免吸入粉尘。如接触皮肤, 立即用大量清水冲洗 15 分钟。废弃物处理需符合《国家危险废物名录》规定, 建议通过专业化学品回收机构处置。安全数据表 (SDS) 可随货提供, 包含详细毒理学数据和应急处理方案。

注: 本产品仅限科研用途, 不适用于食品、药品或化妆品直接生产。使用者应具备有机合成实验技能并了解相关风险。