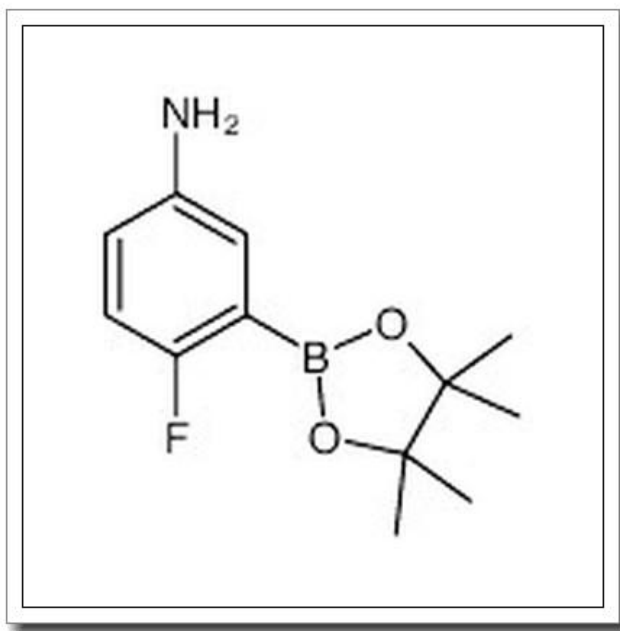


# 4-氟-3-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧杂硼杂环戊烷-2-基)苯胺

*4-fluoro-3-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)aniline*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	4-fluoro-3-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)aniline
中文名称	4-氟-3-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧杂硼杂环戊烷-2-基)苯胺
CAS 号	1152441-29-6
分子式	C <sub>12</sub> H <sub>17</sub> BFN <sub>2</sub> O <sub>2</sub>
分子量	237.078
纯度	>96%

## 产品说明

### 4-氟-3-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧杂硼杂环戊烷-2-基)苯胺产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

本产品为含氟芳香硼酸酯衍生物，化学名称为 4-fluoro-3-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)aniline，CAS 号 1152441-29-6，分子式 C<sub>12</sub>H<sub>17</sub>BFN<sub>2</sub>O<sub>2</sub>，分子量 237.078。其结构包含苯胺基团、氟取代基及硼酸酯保护基团，常温下呈白色至类白色结晶粉末，纯度>96%。该化合物在有机溶剂如二甲基亚砜、甲醇中具有良好溶解性，但遇水易水解，需严格隔绝湿气保存。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为硼酸酯类中间体，该分子中的硼酸酯基团可通过 Suzuki-Miyaura 偶联反应与卤代芳烃高效构建碳-碳键，而苯胺基团可作为后续修饰的活性位点。氟原子的引入增强了化合物的代谢稳定性和脂溶性，使其在药物化学中具有特殊价值。该结构单元广泛用于靶向药物设计，尤其在激酶抑制剂和 PET 显影剂的开发中表现突出。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药研发和材料科学领域。在药物化学中，它是构建 EGFR、ALK 等酪氨酸激酶抑制剂的关键中间体。在材料领域，可用于合成有机电致发光材料（OLED）的硼掺杂单元。具体应用包括但不限于：抗肿瘤先导化合物的结构优化、硼中子俘获治疗（BNCT）剂的前体合成、以及功能化高分子材料的单体制备。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议在-20° C、惰性气体（如氩气）保护下密闭保存，开封后需充氮气密封。使用前需恢复至室温并避免接触湿气，反应体系应严格除水除氧。溶解推荐使用无水级溶剂，配制后建议立即使用。实验室操作需在通风橱中进行，避免吸入粉尘或接触皮肤。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度>96%，核磁共振（<sup>1</sup>H NMR、<sup>13</sup>C NMR）和质谱（MS）验证结构。安全数据表明：该化合物可能引起皮肤刺激（GHS 分类 Category 2），操作时

应佩戴防护手套和护目镜。如意外接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地危险化学品管理规定，建议通过专业机构进行无害化处置。

（注：本说明基于现有研究数据编制，具体应用需结合实验条件进一步验证。）