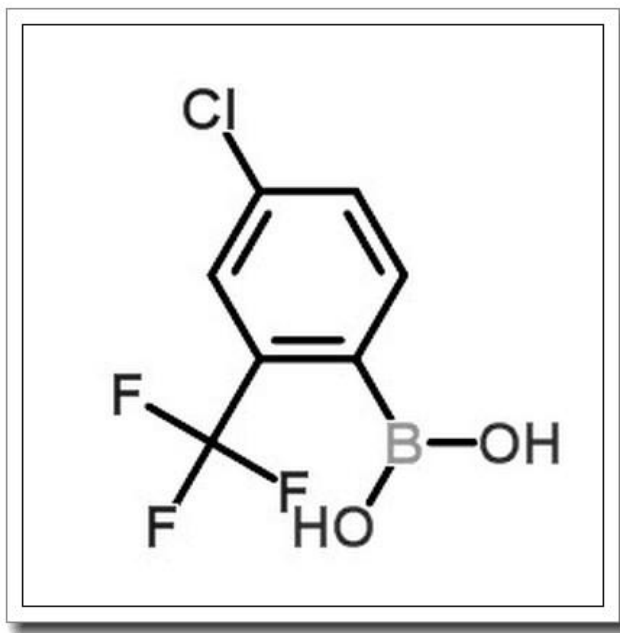


4-氯-2-三氟甲基苯硼酸

[4-chloro-2-(trifluoromethyl)phenyl]boronic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	[4-chloro-2-(trifluoromethyl)phenyl]boronic acid
中文名称	4-氯-2-三氟甲基苯硼酸
CAS 号	313545-41-4
分子式	C7H5BC1F3O2
分子量	224.373
纯度	>96%

产品说明

4-氯-2-三氟甲基苯硼酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

4-氯-2-三氟甲基苯硼酸 ([4-chloro-2-(trifluoromethyl)phenyl]boronic acid) 是一种有机硼化合物，化学式为 $C_7H_5BClF_3O_2$ ，分子量 224.373，CAS 号为 313545-41-4。该化合物为白色至类白色结晶粉末，纯度大于 96%，具有硼酸基团和氯代三氟甲基苯环结构，表现出典型的芳基硼酸反应活性，如 Suzuki 偶联反应中的高选择性。其结构中氯原子和三氟甲基的强吸电子效应，显著增强了硼酸基团的亲电性，适用于苛刻条件下的催化反应。

2. 生物化学功能与重要性

作为芳基硼酸衍生物，该化合物在交叉偶联反应中作为关键中间体，能够高效构建碳-碳键，广泛应用于药物分子和功能材料的合成。三氟甲基的引入增强了产物的脂溶性和代谢稳定性，使其在抗肿瘤、抗炎等药物研发中具有特殊价值。此外，其硼酸基团可与生物分子中的二醇结构可逆结合，潜在应用于糖类或核苷酸的识别研究。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于医药和材料科学领域。在医药化学中，它是合成含三氟甲基芳环类药物的关键砌块，例如蛋白酶抑制剂和激酶调节剂的制备。在材料领域，可用于制备有机发光二极管 (OLED) 的氟代芳香族单元。实验室中常用于 Suzuki-Miyaura 偶联反应，与卤代芳烃或烯烃反应生成联芳烃类化合物。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 2-8°C 干燥避光环境中，长期储存需充惰性气体保护。使用时需在干燥惰性气氛（如氮气或氩气）下操作，避免接触水分以防止硼酸水解。溶解性测试表明，其易溶于四氢呋喃、二甲基亚砜等极性有机溶剂，微溶于醇类，水溶液中需调节 pH 至碱性以增加溶解性。反应后处理建议通过硅胶柱层析纯化。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度>96%，残留溶剂符合 USP 标准。安全数据表明，该化合物对眼睛和皮肤有刺激性，操作时需佩戴防护手套及护目镜，避免吸入粉尘。如意外接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置需遵守当地法规，不可直接排入下水道。提供完整的 MSDS 报告备案。

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验证。