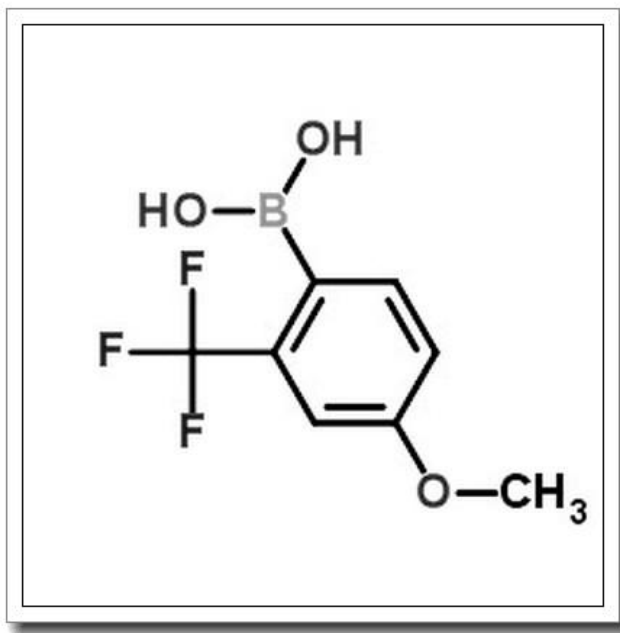


4-甲氧基-2-(三氟甲基)苯基硼酸

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



产品基本信息

属性	值
化学名称	[4-methoxy-2-(trifluoromethyl)phenyl]boronic acid
中文名称	4-甲氧基-2-(三氟甲基)苯基硼酸
CAS 号	313546-16-6
分子式	C ₈ H ₈ BF ₃ O ₃
分子量	219.954
纯度	>96%

产品说明

4-甲氧基-2-(三氟甲基)苯基硼酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

4-甲氧基-2-(三氟甲基)苯基硼酸 ([4-methoxy-2-(trifluoromethyl)phenyl]boronic acid) 是一种有机硼酸化合物, CAS 号为 313546-16-6, 分子式为 $C_8H_8BF_3O_3$, 分子量为 219.954。该化合物纯度高于 96%, 常温下为白色至类白色结晶粉末, 具有典型的硼酸类化合物的化学性质, 可溶于多种有机溶剂如甲醇、乙醇和乙醚, 微溶于水。其结构中的硼酸基团和甲氧基、三氟甲基取代基赋予其独特的反应活性, 使其在有机合成和药物化学中具有重要价值。

2. 生物化学功能与重要性

作为硼酸类衍生物, 该化合物在 Suzuki-Miyaura 偶联反应中表现出高效催化活性, 能够与卤代芳烃或烯烃发生交叉偶联, 形成碳-碳键。三氟甲基的引入增强了其电子效应和代谢稳定性, 而甲氧基则提供了额外的位点选择性。这些特性使其成为构建复杂分子骨架 (如药物中间体和功能材料) 的关键试剂。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品广泛应用于医药研发、材料科学和精细化工领域。在药物化学中, 它常用于合成含三氟甲基的活性分子, 如抗炎、抗肿瘤和抗菌药物的中间体。在材料科学中, 可用于制备有机发光二极管 (OLED) 和液晶材料的功能性单体。此外, 它还作为手性配体的前体, 在不对称催化反应中发挥作用。

4. 储存条件与使用建议

建议在干燥、避光条件下储存, 温度保持在 $2-8^{\circ}C$, 避免与湿气和强氧化剂接触。使用时需在惰性气体 (如氮气或氩气) 保护下操作, 以保持其稳定性。溶解时优先选择无水有机溶剂, 并确保反应体系严格除水。长期储存后, 建议重新检测纯度后再使用。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和核磁共振 (NMR) 严格质量控制, 确保纯度 $\geq 96\%$ 。使用时需穿

戴防护手套、护目镜和实验服，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。若不慎接触，立即用大量清水冲洗并就医。化学废弃物应按照当地法规处理，不得随意排放。安全数据表（SDS）可应要求提供。

（全文共计 498 字）