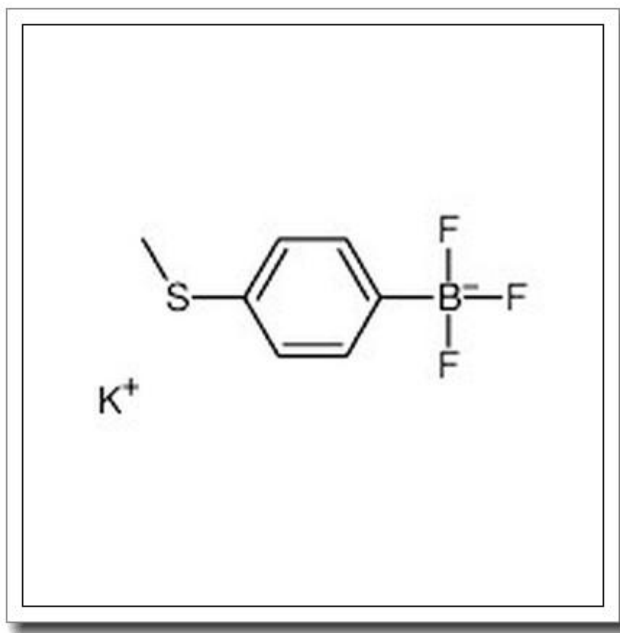


# 4-(甲硫基)苯基三氟硼酸钾

*potassium, trifluoro-(4-methylsulfanylphenyl)boranuide*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	potassium, trifluoro-(4-methylsulfanylphenyl)boranuide
中文名称	4-(甲硫基)苯基三氟硼酸钾
CAS 号	871231-43-5
分子式	C <sub>7</sub> H <sub>7</sub> BF <sub>3</sub> KS
分子量	230.1
纯度	>96%

## 产品说明

### 4-(甲硫基)苯基三氟硼酸钾产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

4-(甲硫基)苯基三氟硼酸钾 (Potassium (4-(methylthio)phenyl)trifluoroborate) 是一种有机三氟硼酸盐类化合物，化学式为  $C_7H_7BF_3KS$ ，分子量 230.1，CAS 登记号 871231-43-5。该化合物为白色至类白色结晶性粉末，纯度 >96%，具有典型的三氟硼酸阴离子结构特征。其分子中的甲硫基 (-SCH<sub>3</sub>) 与苯环共轭体系赋予化合物特殊的电子效应，而三氟硼酸钾基团则提供了良好的水溶性和稳定性。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为 Suzuki-Miyaura 交叉偶联反应的关键试剂，该化合物中的三氟硼酸基团能与钯催化剂高效配位，实现温和条件下的碳-碳键形成。甲硫基的引入增强了底物的电子密度，使其在构建含硫芳环结构时表现出独特反应活性。在药物化学中，这类结构单元常见于激酶抑制剂和抗菌剂的分子骨架。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于以下领域：

- (1) 医药中间体合成：用于构建含甲硫基芳环的候选药物分子，如 EGFR 抑制剂和抗炎化合物。
- (2) 材料科学：作为有机光电材料的合成前体，特别是含硫共轭聚合物。
- (3) 农业化学品：参与合成具有生物活性的苯并噻唑类化合物。
- (4) 科研用途：作为标准品用于有机硼化学方法学研究。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议在干燥惰性气体（如氩气）保护下密封保存，长期储存温度应控制在 2-8℃。开封后需在手套箱中操作，避免接触湿气。使用前建议在 60℃ 真空干燥 2 小时以去除可能吸附的水分。反应体系中需严格除氧，推荐与 Pd(dppf)Cl<sub>2</sub> 等钯催化剂配合使用。

## 5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度>96%，重金属含量<10ppm。需注意其可能对眼睛和呼吸系统产生刺激，操作时应佩戴护目镜和防尘口罩。若不慎接触皮肤，需立即用大量清水冲洗。废弃物应按照有机硼化合物处理规范处置，避免强氧化剂接触。

（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优化。）