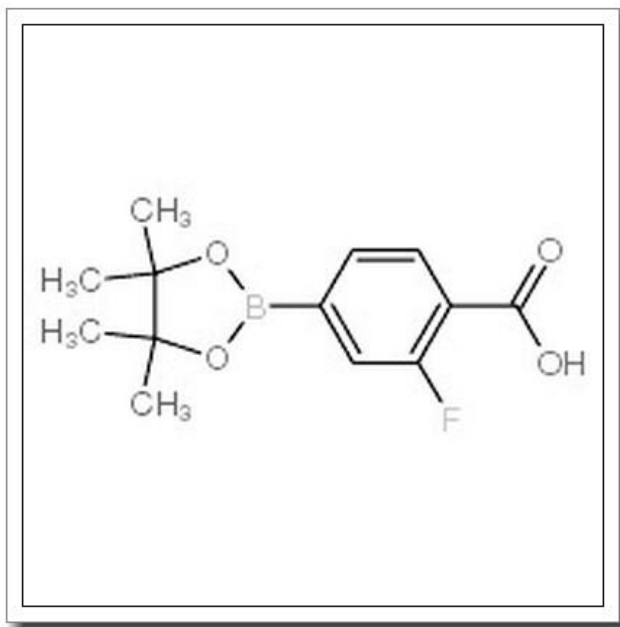


4-羧基-3-氟苯基硼酸频哪醇酯

4-Carboxy-3-Fluorobenzeneboronicacid, Pinacolester



产品基本信息

| 属性 | 值 |
|-------|----------------------------------------------------|
| 化学名称 | 4-Carboxy-3-Fluorobenzeneboronicacid, Pinacolester |
| 中文名称 | 4-羧基-3-氟苯基硼酸频哪醇酯 |
| CAS 号 | 867256-77-7 |
| 分子式 | C ₁₃ H ₁₆ BF ₀₄ |
| 分子量 | 266.073 |
| 纯度 | >96% |

产品说明

4-羧基-3-氟苯基硼酸频哪醇酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

4-羧基-3-氟苯基硼酸频哪醇酯 (4-Carboxy-3-Fluorobenzenboronic acid Pinacol ester) 是一种含氟硼酸酯类化合物, CAS 号为 867256-77-7, 分子式为 $C_{13}H_{16}BF_4$, 分子量 266.073。该化合物以白色至类白色结晶粉末形式存在, 纯度 $\geq 96\%$, 兼具羧酸基团和硼酸酯基团的特性, 在有机溶剂如二甲基亚砜 (DMSO) 和甲醇中具有良好溶解性。其结构中的频哪醇酯保护基增强了硼酸基团的稳定性, 适用于对水解敏感的反应体系。

2. 生物化学功能与重要性

作为硼酸类衍生物, 该化合物可通过 Suzuki-Miyaura 偶联反应高效构建碳-碳键, 是过渡金属催化交叉偶联反应的关键中间体。氟原子的引入增强了其电子效应和代谢稳定性, 而羧基提供了进一步功能化修饰的位点, 使其在药物化学和材料科学中具有独特价值。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品广泛应用于以下领域:

- 药物研发: 作为构建含氟芳环结构的砌块, 用于激酶抑制剂、抗肿瘤药物的合成。
- 材料科学: 参与制备有机发光二极管 (OLED) 和液晶材料的共轭体系。
- 化学合成: 作为硼酸保护形式, 在偶联反应中减少副反应, 提高产率。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 、惰性气体 (如氩气) 保护下避光保存, 开封后需严格防潮。使用前需平衡至室温以避免结露。溶解时优先选用无水 DMSO, 配制的溶液建议现配现用。操作时需在通风橱中进行, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 核磁共振 (NMR) 和质谱 (MS) 验证结构。安全数

据表明其具有刺激性，操作时应佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩。如意外接触眼睛，需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置需符合当地化学品管理法规。

注：本说明基于现有实验数据编制，具体应用需结合用户实验条件优化。更多技术参数请索取 COA（分析证书）。