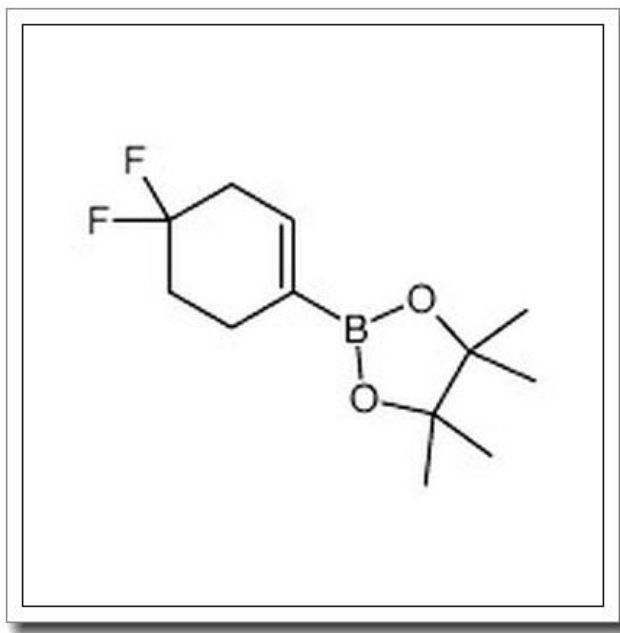


4,4-二氟环己烯-1-硼酸频哪醇酯

2-(4,4-difluorocyclohexen-1-yl)-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane



产品基本信息

| 属性 | 值 |
|-------|---|
| 化学名称 | 2-(4,4-difluorocyclohexen-1-yl)-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane |
| 中文名称 | 4,4-二氟环己烯-1-硼酸频哪醇酯 |
| CAS 号 | 1227068-84-9 |
| 分子式 | C ₁₂ H ₁₉ BF ₂ O ₂ |
| 分子量 | 244.086 |
| 纯度 | >96% |

产品说明

4, 4-二氟环己烯-1-硼酸频哪醇酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 2-(4, 4-二氟环己烯-1-基)-4, 4, 5, 5-四甲基-1, 3, 2-二氧硼杂环戊烷，是一种含氟硼酸酯类化合物。其 CAS 号为 1227068-84-9，分子式为 $C_{12}H_{19}BF_2O_2$ ，分子量为 244.086。该化合物为白色至类白色结晶或粉末，纯度 $\geq 96\%$ ，具有稳定的硼酸酯结构，可在惰性气氛下长期保存。其独特之处在于环己烯基上的二氟取代，赋予分子特殊的电子效应和空间位阻，使其在偶联反应中表现出高反应活性。

2. 生物化学功能与重要性

作为 Suzuki-Miyaura 偶联反应的关键中间体，该硼酸酯能与卤代芳烃或烯烃在钯催化剂作用下高效构建碳-碳键。二氟取代基的引入可调节产物的亲脂性和代谢稳定性，在药物化学中常用于优化先导化合物的生物利用度。此外，其硼酸酯结构对水氧稳定性优于硼酸，更易于储存和操作，是医药研发和材料科学中的重要合成砌块。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品广泛应用于以下领域：医药研发中用于合成含氟靶向药物分子，特别是抗肿瘤和抗感染化合物；材料科学中用于制备含氟有机光电材料，如 OLED 发光层中间体；农业化学中作为高效农药的合成前体。具体用途包括但不限于：作为 Suzuki 偶联反应的硼试剂、氟化分子库构建的核心单元、以及复杂天然产物修饰的氟化官能团来源。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 、惰性气体（如氩气或氮气）保护下避光保存，开封后需充惰性气体密封。使用前需在干燥环境下恢复至室温以避免结露。反应体系中建议添加分子筛（ 4\AA ）以控制水分含量，偶联反应时与钯催化剂（如 $Pd(dppf)Cl_2$ ）的摩尔比通常为 1:1.05 至 1:1.2。本品对湿气敏感，操作需在手套箱或干燥条件下进行。

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 (^1H NMR、 ^{13}C NMR、 ^{19}F NMR) 和质谱 (HRMS) 验证结构。安全数据表明：避免吸入粉尘或接触皮肤，操作时需佩戴护目镜、防尘口罩及丁腈手套。若不慎接触眼睛，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应作为有害化学品处理，遵守当地环保法规。详细安全信息请参阅随货提供的材料安全数据表 (MSDS)。