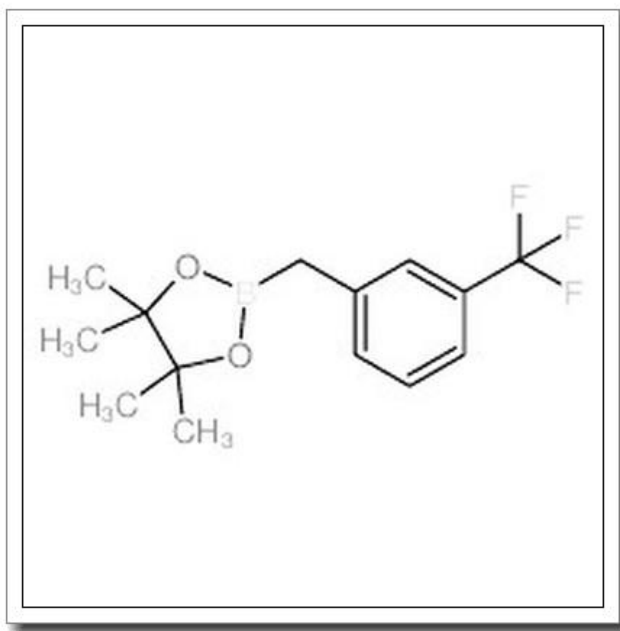


# 4,4,5,5-四甲基-2-(3-(三氟甲基)苄基)-1,3,2-二噁硼烷

*4, 4, 5, 5-Tetramethyl-2-(3-(trifluoromethyl)benzyl)-1, 3, 2-dioxaborolane*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	4, 4, 5, 5-Tetramethyl-2-(3-(trifluoromethyl)benzyl)-1, 3, 2-dioxaborolane
中文名称	4, 4, 5, 5-四甲基-2-(3-(三氟甲基)苄基)-1, 3, 2-二噁硼烷
CAS 号	1190235-39-2
分子式	C <sub>14</sub> H <sub>18</sub> BF <sub>3</sub> O <sub>2</sub>
分子量	286.098
纯度	>96%

## 产品说明

### 4, 4, 5, 5-四甲基-2-(3-(三氟甲基)苄基)-1, 3, 2-二噁硼烷产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

本产品为含硼有机化合物，化学名称为 4, 4, 5, 5-四甲基-2-(3-(三氟甲基)苄基)-1, 3, 2-二噁硼烷，CAS 号 1190235-39-2，分子式  $C_{14}H_{18}BF_3O_2$ ，分子量 286.098。其结构特征为二噁硼烷环与三氟甲基苄基的协同组合，纯度经 HPLC 验证  $\geq 96\%$ 。该化合物在常温下呈白色至类白色结晶粉末，易溶于常见有机溶剂如二氯甲烷、THF 和乙醚，但对湿度敏感，需在惰性气氛下操作。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为硼酸酯类衍生物，该化合物在 Suzuki-Miyaura 偶联反应中表现出高效催化活性，其三氟甲基苄基结构可显著增强电子效应，适用于构建含氟芳烃骨架。在药物化学中，硼酸酯基团作为关键中间体，能够与卤代烃发生选择性交叉偶联，广泛应用于靶向药物分子的结构修饰与功能化。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于医药研发和材料科学领域。在抗肿瘤药物设计中，可作为 EGFR 抑制剂合成的关键砌块；在 OLED 材料开发中，用于制备含氟电子传输层材料。具体实验场景包括但不限于：过渡金属催化反应、同位素标记前体制备、以及作为硼中子俘获治疗 (BNCT) 的潜在候选分子。

#### 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，开封后需充氮气密封。使用前需在干燥箱中恢复至室温，避免直接暴露于空气中。反应体系中建议添加分子筛以控制水分含量，溶剂需预先脱氧处理。实验操作应在通风橱中进行，并佩戴耐化学腐蚀手套。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品经核磁共振 ( $^1H$  NMR、 $^{13}C$  NMR、 $^{19}F$  NMR) 和质谱 (HRMS) 严格表征，批号关联完整分析证书。安全数据表明其急性毒性类别为 4 级 ( $LD_{50} > 2000$  mg/kg)，

但接触可能引起眼睛和皮肤刺激。泄漏处理需使用惰性吸附材料，废弃物应作为有害化学品处置。详细安全信息请参阅随货提供的 SDS 文件。