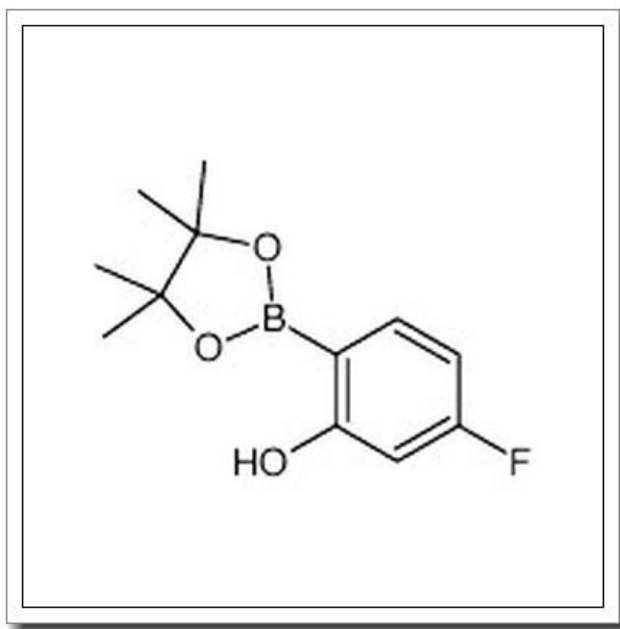


5-fluoro-2-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)phenol

5-fluoro-2-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)phenol



产品基本信息

属性	值
化学名称	5-fluoro-2-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)phenol
中文名称	5-氟-2-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼olan-2-基)苯酚
CAS 号	1038828-32-8
分子式	C ₁₂ H ₁₆ BF ₃ O ₃
分子量	238.063
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

5-fluoro-2-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)phenol (CAS 号: 1038828-32-8) 是一种含氟苯酚类硼酸酯化合物, 分子式为 C₁₂H₁₆BF₃O₃, 分子量为 238.063。该化合物以白色至类白色固体形式存在, 纯度高于 96%, 具有稳定的硼酸酯结构 (4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼杂环戊烷基团) 和酚羟基活性位点, 同时氟原子的引入增强了其反应选择性。其结构特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

该化合物作为硼酸酯衍生物, 可通过 Suzuki-Miyaura 偶联反应高效构建碳-碳键, 是合成含氟芳香族化合物的关键中间体。氟原子的存在可调节分子脂溶性和代谢稳定性, 而硼酸酯基团则为交叉偶联反应提供高反应活性位点, 因此在靶向药物设计和生物活性分子修饰中具有广泛应用潜力。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发和材料科学领域:

- 医药中间体: 用于合成含氟抗肿瘤、抗感染药物 (如 EGFR 抑制剂类化合物)。
- 材料化学: 作为有机发光二极管 (OLED) 和液晶材料的合成前体。
- 科研用途: 在有机方法学研究中作为硼酸保护基或偶联反应模板。

4. 储存条件与使用建议

建议在惰性气体 (如氮气) 保护下密封保存, 储存温度 2-8°C, 避免光照和潮湿环境。使用时需在干燥环境下操作, 溶解推荐使用无水 THF 或 DMSO 等惰性溶剂。因硼酸酯易水解, 反应体系需严格除水。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度 ≥96%, 并提供 COA 分析证书。安全信息:

- 危害提示: 可能引起皮肤/眼睛刺激, 吸入或食入有害。
- 防护措施: 操作时佩戴防尘口罩、化学护目镜及丁腈手套, 在通风橱中进行称

量。

- 应急处理：接触皮肤后立即用大量清水冲洗，就医咨询。

废弃物处置需符合当地化学品管理法规，建议通过专业危废处理机构回收。