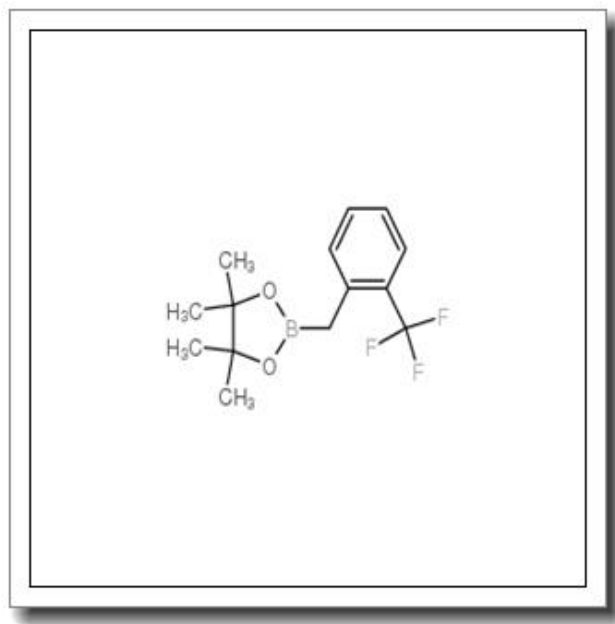


## 2-三氟甲基苄基硼酸频哪醇酯

*4, 4, 5, 5-Tetramethyl-2-(2-(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-(2-(trifluoromethyl)benzyl)-1, 3, 2-dioxaborolane
中文名称	2-三氟甲基苄基硼酸频哪醇酯
CAS 号	475250-54-5
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

### 2-三氟甲基苄基硼酸频哪醇酯产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

2-三氟甲基苄基硼酸频哪醇酯（化学名称：4,4,5,5-Tetramethyl-2-(2-(trifluoromethyl)benzyl)-1,3,2-dioxaborolane）是一种有机硼酸酯类化合物，CAS 号为 475250-54-5，分子式为 C<sub>14</sub>H<sub>18</sub>BF<sub>3</sub>O<sub>2</sub>，分子量为 286.098。该化合物为白色至类白色结晶或粉末，纯度 ≥96%，具有稳定的硼酸酯结构，频哪醇基团的存在增强了其溶解性和反应活性。三氟甲基的引入赋予其独特的电子效应和疏水性，使其在有机合成中表现出优异的反应特性。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为硼酸酯衍生物，该化合物在 Suzuki-Miyaura 偶联反应中作为关键中间体，能够高效构建碳-碳键，广泛应用于药物分子和功能材料的合成。其硼酸酯官能团在生理条件下可水解为活性硼酸形式，因此在生物探针设计和靶向药物开发中具有潜在价值。三氟甲基的强吸电子特性可调节分子极性，提升代谢稳定性，是医药化学中常见的药效团修饰策略。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于以下领域：

- 医药研发：作为抗肿瘤、抗炎药物分子合成的砌块，尤其适用于含三氟甲基结构的活性化合物制备。
- 材料科学：用于合成有机光电材料（如 OLED 发光层材料）中的硼掺杂单元。
- 化学研究：在过渡金属催化反应中作为硼试剂，参与 C-C 键偶联、C-H 键活化等反应。
- 农业化学：作为新型农药分子开发中的中间体。

#### 4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中，置于干燥、避光、-20℃至 4℃的环境中，避免与湿气接触。

开封后建议充入惰性气体保护。使用时需在干燥惰性气氛（如氮气或氩气）下操作，反应溶剂需严格除水。本品对空气敏感，长期暴露可能导致水解失效。

#### 5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC、NMR 和质谱进行纯度验证，批次间偏差 $\leq$ 1%。本品属于刺激性化学品，操作时需佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩，避免吸入或皮肤接触。如不慎接触眼睛，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应按照国家有机硼化合物处置规范处理，禁止直接排放至环境中。

（注：本说明基于现有研究数据，具体应用需结合实验条件优化。安全数据详见随附的 MSDS 文件。）