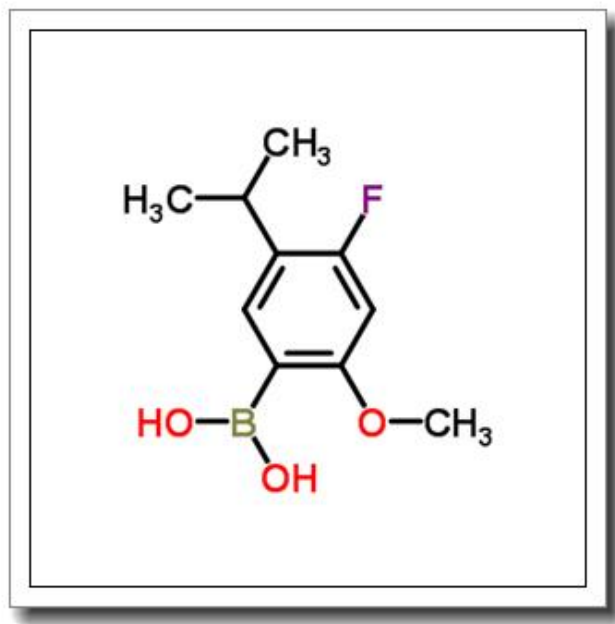


4-氟-5-异丙基-2-甲氧基苯硼酸

(4-Fluoro-5-isopropyl-2-methoxyphenyl)boronic acid



产品基本信息

| 属性 | 值 |
|-------|--|
| 化学名称 | (4-Fluoro-5-isopropyl-2-methoxyphenyl)boronic acid |
| 中文名称 | 4-氟-5-异丙基-2-甲氧基苯硼酸 |
| CAS 号 | 875446-29-0 |
| 分子式 | C ₁₀ H ₁₄ BF ₃ O ₃ |
| 分子量 | 212.026 |
| 纯度 | ≥96% |

产品说明

4-氟-5-异丙基-2-甲氧基苯硼酸产品说明

1. 产品概述与化学特性

4-氟-5-异丙基-2-甲氧基苯硼酸 ((4-Fluoro-5-isopropyl-2-methoxyphenyl)boronic acid) 是一种有机硼酸化合物, CAS 号为 875446-29-0, 分子式为 $C_{10}H_{14}BF_3$, 分子量为 212.026。该化合物为白色至类白色结晶或粉末, 纯度 $\geq 96\%$, 具有硼酸类化合物的典型反应活性, 如与二醇形成稳定的硼酸酯, 以及在 Suzuki 偶联反应中作为关键中间体。其结构中含氟、异丙基和甲氧基等官能团, 赋予其独特的电子效应和空间位阻特性。

2. 生物化学功能与重要性

作为硼酸衍生物, 该化合物在生物化学领域常用于酶抑制剂设计和药物分子修饰。硼酸基团可与生物分子中的羟基或氨基选择性结合, 因此在蛋白酶体抑制剂和糖类识别探针开发中具有重要价值。其氟原子和甲氧基的引入可调节化合物的脂溶性和靶标亲和力, 在药物先导化合物优化中发挥关键作用。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要应用于以下领域:

- 医药研发: 作为 Suzuki-Miyaura 交叉偶联反应的底物, 用于构建含氟芳基结构的药物分子, 如抗肿瘤和抗炎化合物。
- 材料科学: 用于合成有机光电材料中的氟代芳烃单元, 改善材料的热稳定性和电子传输性能。
- 化学合成: 作为手性配体或催化剂组分, 参与不对称合成反应。

4. 储存条件与使用建议

建议在干燥、避光条件下储存, 温度控制在 $2-8^{\circ}\text{C}$, 长期保存需充惰性气体保护。使用时需在惰性气氛 (如氮气或氩气) 中操作, 避免接触水分和强氧化剂。溶解时可选用四氢呋喃、二甲基亚砜等无水溶剂, 溶液现配现用。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，并提供核磁共振（NMR）和质谱（MS）数据以确证结构。安全信息：

- 危害提示：可能引起皮肤和眼睛刺激，吸入或误食有害。
- 防护措施：操作时佩戴防护手套、护目镜和防尘口罩，在通风橱中进行。
- 应急处理：接触皮肤后立即用大量清水冲洗，如不慎吸入需移至空气新鲜处并就医。

本产品仅限科研用途，不适用于药品、食品或家庭使用。