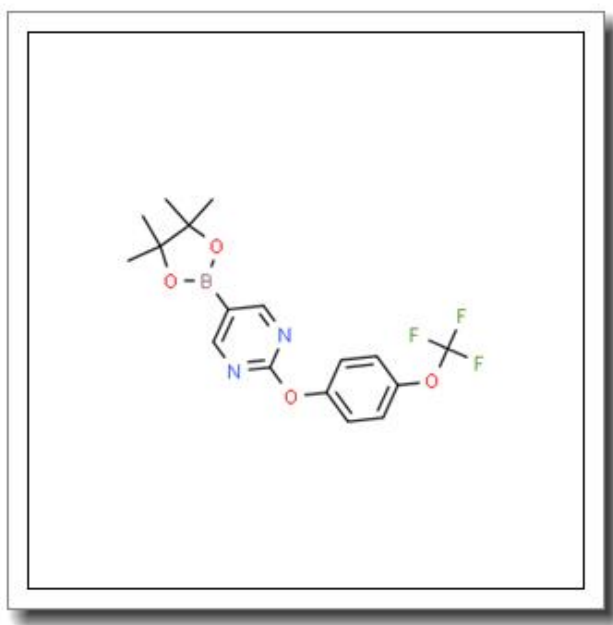


5-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼杂环戊烷-2-基)-2-(4-(三氟甲氧基)苯氧基)嘧啶

5-(4,4,5,5-Tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-2-(4-(trifluoromethoxy)phenoxy)pyrimidine



产品基本信息

属性	值
化学名称	5-(4,4,5,5-Tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-2-(4-(trifluoromethoxy)phenoxy)pyrimidine
中文名称	5-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼杂环戊烷-2-基)-2-(4-(三氟甲氧基)苯氧基)嘧啶
CAS 号	1599467-81-8
分子式	C ₁₇ H ₁₈ BF ₃ N ₂ O ₄
分子量	382.14
纯度	≥96%

产品说明

5-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼杂环戊烷-2-基)-2-(4-(三氟甲氧基)苯氧基)嘧啶产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为高纯度有机硼化合物，化学名称 5-(4,4,5,5-Tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-2-(4-(trifluoromethoxy)phenoxy)pyrimidine, CAS 号 1599467-81-8, 分子式 C₁₇H₁₈BF₃N₂O₄, 分子量 382.14。其结构包含嘧啶环、三氟甲氧基苯氧基及硼酸酯基团，常温下呈白色至类白色结晶粉末，纯度 ≥96%。该化合物在有机溶剂如 DMSO、甲醇中具有良好溶解性，但对湿度敏感，需避免水解。

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 偶联反应中作为关键中间体，能够高效构建碳-碳键。其嘧啶骨架和三氟甲氧基的引入增强了分子极性，使其在药物化学中成为修饰生物活性的重要结构单元，尤其适用于靶向激酶抑制剂的开发。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品广泛应用于医药研发和材料科学领域。在药物发现中，用于合成抗肿瘤、抗炎及中枢神经系统药物先导化合物；在材料领域，可作为有机发光二极管 (OLED) 或液晶材料的中间体。具体实验用途包括但不限于：硼化反应底物、杂环化合物结构修饰、放射性标记前体合成。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C、惰性气体（如氩气）保护下避光保存，开封后需充氮密封。使用前需平衡至室温以避免结露，称量应在干燥环境下快速完成。反应体系中需严格除氧除水，推荐搭配钯催化剂（如 Pd(PPh₃)₄）进行偶联反应。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC、NMR 及质谱严格质检，批号关联完整分析证书。操作时需佩戴防护

手套及护目镜，避免吸入粉尘或接触皮肤。如意外接触，立即用大量清水冲洗并就医。化学废弃物应按照有机硼化合物类别规范处置。

注：本说明仅限科研用途，不适用于诊断或治疗。具体实验方案需根据实际需求优化。