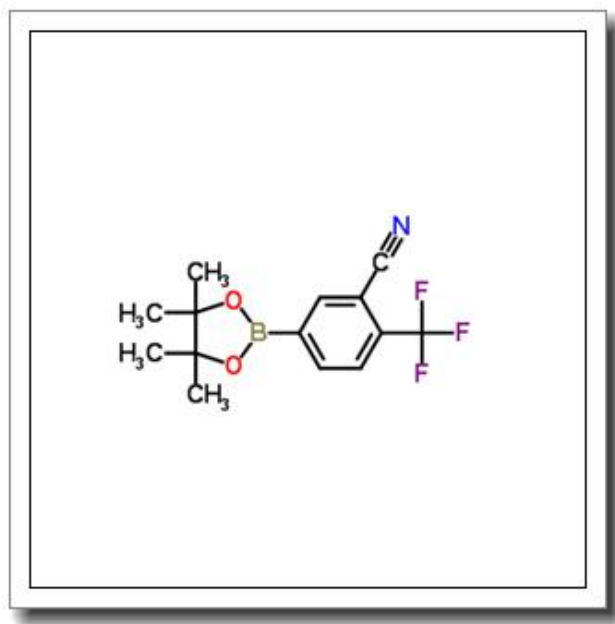


产品_7001

5-(4,4,5,5-Tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-2-(trifluoromethyl)benzonitrile



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-(trifluoromethyl)benzonitrile
中文名称	产品_7001
CAS 号	1220219-14-6
分子式	C ₁₄ H ₁₅ BF ₃ N ₂ O ₂
分子量	297.081
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-(三氟甲基)苯甲腈 (产品_7001) 是一种高纯度有机硼化合物, CAS 号为 1220219-14-6, 分子式为 $C_{14}H_{15}BF_3N_2O_2$, 分子量 297.081。该化合物以白色至类白色结晶粉末形式存在, 纯度 $\geq 96\%$, 具有显著的化学稳定性和反应活性, 其结构中的硼酸酯基团和氰基使其成为重要的合成中间体。

1. 产品概述与化学特性

该化合物属于芳基硼酸酯衍生物, 其分子结构包含四甲基二氧硼杂环戊烷基团和三氟甲基苯甲腈骨架。硼酸酯基团在 Suzuki 偶联等交叉偶联反应中表现出高反应活性, 而三氟甲基和氰基的引入增强了其电子效应和生物活性。该产品易溶于常见有机溶剂如二氯甲烷、THF 和乙醚, 但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

作为关键医药中间体, 该化合物可通过硼酸酯基团实现高效碳-碳键形成, 广泛应用于靶向药物分子的构建。三氟甲基的强吸电子特性可显著调节分子脂溶性和代谢稳定性, 使其在抗肿瘤、抗炎药物研发中具有特殊价值。氰基的存在进一步扩展了其作为结构修饰位点的应用潜力。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于以下领域:

- 医药研发: 作为 EGFR 抑制剂、激酶抑制剂等小分子药物的核心片段
- 材料科学: 用于合成有机光电材料中的电子传输单元
- 农药化学: 作为新型杀虫剂和杀菌剂的结构模块
- 学术研究: 在金属催化反应机理研究中作为探针分子

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, 开封后需充氮密封。使用时应避免接触水分, 反应体系需严格除氧。建议在通风橱中操作, 使用干燥的玻璃器皿和无水溶剂。长期储存建议定期检测纯度变化。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC、NMR 和质谱进行严格质量控制，确保批次间稳定性。安全数据表明该化合物具有刺激性，操作时需佩戴防护手套、护目镜和防尘口罩。避免吸入粉尘或接触皮肤，如不慎接触应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应按照危险化学品处理规范处置。

该产品需在专业人员指导下使用，建议首次使用者查阅详细材料安全数据表（MSDS）并制定应急预案。