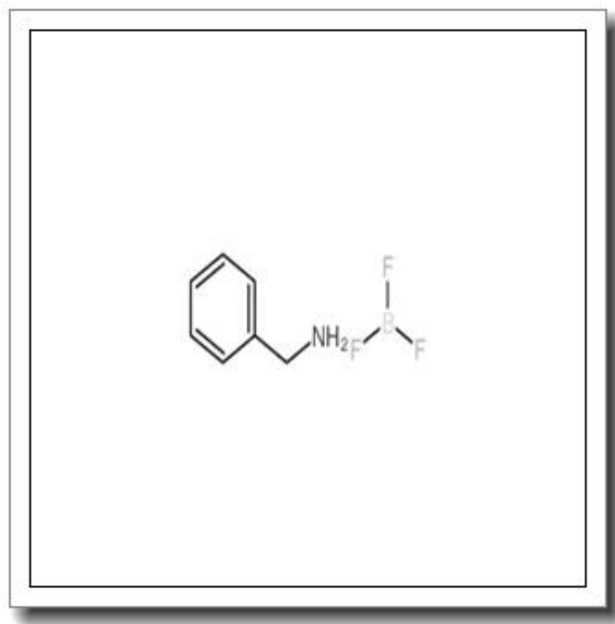


(苯胺)三氟硼

phenylmethanamine, trifluoroborane



产品基本信息

属性	值
化学名称	phenylmethanamine, trifluoroborane
中文名称	(苯胺)三氟硼
CAS 号	696-99-1
分子式	C ₇ H ₉ BF ₃ N
分子量	174.959
纯度	≥ 96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

苯胺三氟硼 (phenylmethanamine, trifluoroborane) 是一种有机硼化合物, 化学式为 $C_7H_9BF_3N$, 分子量为 174.959, CAS 号为 696-99-1。该化合物由苯甲基胺与三氟化硼结合而成, 纯度通常 $\geq 96\%$, 呈白色至类白色结晶或粉末状。其结构中含有的三氟硼基团 (BF_3) 赋予其独特的路易斯酸性, 而苯胺基团则提供了芳香性和反应活性, 使其在有机合成中具有重要价值。

2. 生物化学功能与重要性

苯胺三氟硼在生物化学领域主要作为硼酸酯类化合物的前体或中间体, 可用于蛋白质修饰、糖类衍生物合成及药物分子设计。其路易斯酸性特性使其能够与含氧、氮的官能团 (如羟基、氨基) 选择性结合, 因此在酶抑制研究和生物共轭反应中具有潜在应用价值。此外, 该化合物在硼中子捕获治疗 (BNCT) 相关研究中也作为含硼载体的候选分子。

3. 主要应用领域与具体用途

该试剂广泛应用于医药研发、材料科学和有机合成领域。在医药化学中, 它是构建含硼靶向药物 (如蛋白酶抑制剂) 的关键中间体; 在材料领域, 可用于制备耐高温聚合物或荧光材料的单体; 在有机合成中, 常作为 Suzuki-Miyaura 偶联反应的硼酸酯前体。具体实验用途包括但不限于: 催化反应配体、手性辅助试剂及功能化分子砌块。

4. 储存条件与使用建议

苯胺三氟硼需密封保存于干燥、阴凉 ($2-8^{\circ}C$) 环境中, 避免与湿气、强氧化剂接触。建议在惰性气体 (如氮气或氩气) 保护下操作, 开封后需尽快使用。溶解性测试表明其易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂, 水溶液中可能缓慢水解, 故推荐现配现用。实验人员应佩戴防护手套、护目镜, 并在通风橱中操作。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和 NMR 严格检测, 确保纯度 $\geq 96\%$, 并符合国际化学品标准 (如

ACS 级)。安全数据表明, 其急性毒性 (LD50) 属中等危害类别, 接触皮肤或眼睛可能引起刺激。如发生泄漏, 需用惰性吸附材料处理并避免扬尘。废弃物应作为有害化学废料处置, 遵守当地环保法规。详细安全信息请参阅随附的 MSDS (物质安全数据表)。