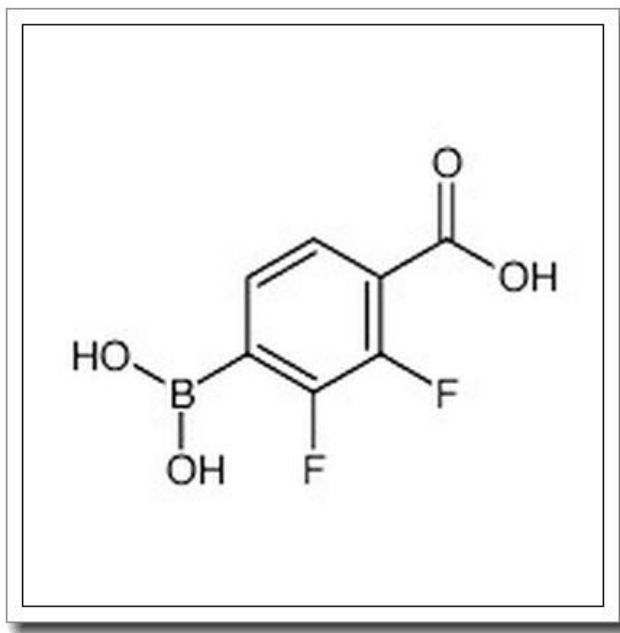


# 2,3-二氟-4-羧基苯硼酸

*4-Borono-2,3-difluorobenzoic acid*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	4-Borono-2,3-difluorobenzoic acid
中文名称	2,3-二氟-4-羧基苯硼酸
CAS 号	1029716-92-4
分子式	C <sub>7</sub> H <sub>5</sub> BF <sub>2</sub> O <sub>4</sub>
分子量	201.92
纯度	>96%

## 产品说明

### 2,3-二氟-4-羧基苯硼酸产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

2,3-二氟-4-羧基苯硼酸 (4-Borono-2,3-difluorobenzoic acid) 是一种含氟苯硼酸衍生物, 化学式为  $C_7H_5BF_2O_4$ , 分子量 201.92, CAS 号 1029716-92-4。该化合物以白色至类白色结晶粉末形式存在, 纯度 >96%, 兼具硼酸基团和羧酸基团的反应特性。其分子结构中的邻位双氟取代赋予其独特的电子效应和空间位阻, 显著影响其与生物分子或材料的相互作用模式。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为硼酸类化合物的代表, 该产品可通过硼酸酯键与糖类、蛋白质等生物分子可逆结合, 这一特性使其在糖蛋白识别、酶抑制研究中具有重要价值。羧酸基团的存在进一步扩展了其修饰能力, 可通过酰胺化反应与氨基化合物偶联。双氟取代不仅增强其代谢稳定性, 还能作为  $^{19}F$  NMR 探针的潜在标记位点, 为结构生物学研究提供工具。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发领域, 本品是合成酪氨酸激酶抑制剂的关键中间体, 尤其用于构建靶向抗癌药物的硼酸片段。材料科学中, 其可作为有机框架材料 (MOFs/COFs) 的构建单元, 通过硼酸缩合反应形成多孔结构。分析化学方面, 适用于开发荧光传感器, 特异性检测过氧化氢等活性氧物种。此外, 在 PET 显影剂开发中, 其硼酸基团可用于  $^{18}F$  标记的前体设计。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议长期储存于  $-20^{\circ}C$ 、惰性气体保护的密闭容器中, 短期使用可存放于  $4^{\circ}C$  干燥环境。开封后需避免吸湿, 建议在手套箱或干燥器中操作。溶解时优先选用 DMF、DMSO 等极性非质子溶剂, 水溶液需现配现用 (pH 需调节至 7-9 以维持硼酸基团活性)。与氨基化合物反应时, 建议采用 EDC/HOBt 等缩合试剂体系。

## 5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度>96%，重金属含量<10ppm，符合生化试剂标准。操作时需佩戴防护手套及护目镜，避免吸入粉尘。MSDS 数据显示其急性毒性类别为 4 级（LD50>2000mg/kg），但接触后仍需立即用大量清水冲洗。废弃物处理应遵守有机硼化合物处置规范，不可直接排入下水系统。

注：具体实验方案建议根据目标反应体系进行优化，本产品在 pH 敏感型反应中需特别注意缓冲条件的选择。