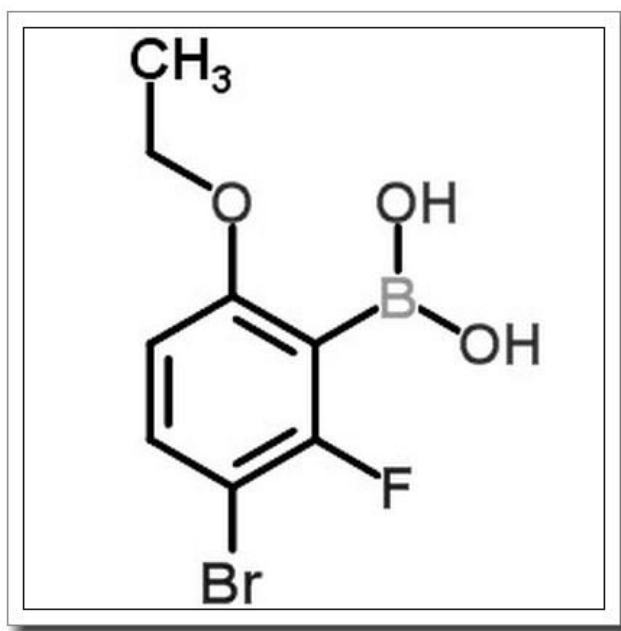


(3-bromo-6-ethoxy-2-fluoro-phenyl)boronic acid

(3-bromo-6-ethoxy-2-fluoro-phenyl)boronic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	(3-bromo-6-ethoxy-2-fluoro-phenyl)boronic acid
中文名称	(3-bromo-6-ethoxy-2-fluoro-phenyl)boronic acid
CAS 号	1309980-98-0
分子式	C ₈ H ₉ BBrF ₀ 3
分子量	262.869
纯度	>96%

产品说明

(3-溴-6-乙氧基-2-氟苯基)硼酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

(3-溴-6-乙氧基-2-氟苯基)硼酸 (CAS 号: 1309980-98-0) 是一种含卤素取代的芳香硼酸化合物, 分子式为 $C_8H_9BrFO_3$, 分子量 262.869。本品为白色至类白色结晶性粉末, 纯度 >96%, 具有硼酸类化合物的典型特性, 包括良好的热稳定性和在有机溶剂 (如甲醇、二甲基亚砷) 中的可溶性。其结构中的溴、氟和乙氧基官能团赋予其独特的反应活性, 适用于多种偶联反应。

2. 生物化学功能与重要性

作为 Suzuki-Miyaura 交叉偶联反应的关键中间体, 该化合物可通过硼酸基团与卤代芳烃的钯催化偶联, 高效构建碳-碳键。其分子中的溴和氟原子可进一步参与亲核取代或过渡金属催化反应, 在复杂分子修饰和药物活性片段合成中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

- 医药研发: 用于合成含氟/溴芳香结构的候选药物分子, 尤其在抗肿瘤和中枢神经系统药物设计中常见。
- 材料科学: 作为有机发光二极管 (OLED) 和液晶材料的中间体。
- 农药化学: 参与构建具有生物活性的杂环化合物。
- 学术研究: 在金属有机化学和催化机理研究中作为模型底物。

4. 储存条件与使用建议

- 储存于 $-20^{\circ}C$ 、避光、干燥的惰性气体 (如氩气) 环境中, 开封后需密封防潮。
- 使用时避免接触强氧化剂, 建议在通风橱中操作, 溶解时可轻微加热 ($\leq 60^{\circ}C$) 以加速溶解。
- 反应体系中需严格除氧, 推荐以四氢呋喃/水混合溶剂为反应介质。

5. 质量控制与安全信息

- 质量控制: 通过 HPLC 测定纯度, 核磁共振 ($^1H/^{13}C$ NMR) 和质谱 (MS) 验证结

构。

- 安全警示：对眼睛和皮肤有刺激性，操作时需佩戴防护手套及护目镜。若接触皮肤，立即用大量清水冲洗。
- 废弃物处理：按危险化学品规范处置，不可直接排入下水道。

本产品仅限科研用途，不适用于临床或食品领域。