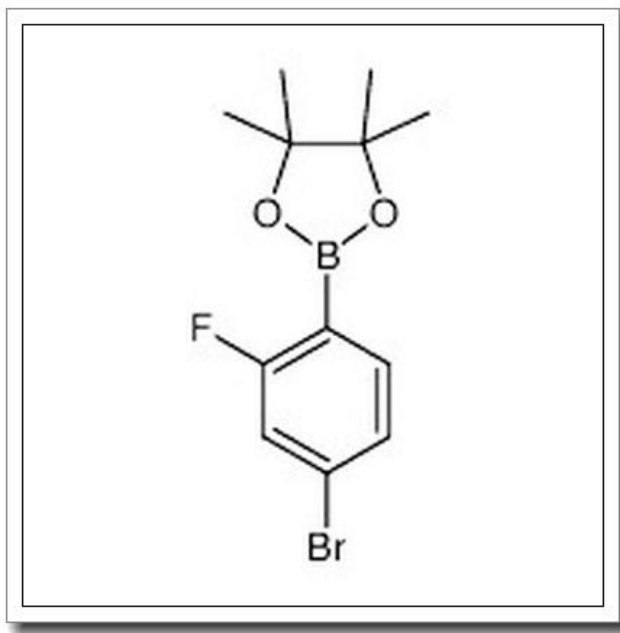


2-氟-4-溴苯硼酸频哪醇酯

2-(4-bromo-2-fluorophenyl)-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-(4-bromo-2-fluorophenyl)-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane
中文名称	2-氟-4-溴苯硼酸频哪醇酯
CAS 号	1326316-85-1
分子式	C ₁₂ H ₁₅ BBrF ₀ 2
分子量	300.96
纯度	>96%

产品说明

2-(4-溴-2-氟苯基)-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼杂环戊烷产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 2-(4-bromo-2-fluorophenyl)-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane，中文别名 2-氟-4-溴苯硼酸频哪醇酯，CAS 号 1326316-85-1。其分子式为 $C_{12}H_{15}BBrF_2$ ，分子量 300.96，纯度 $\geq 96\%$ 。该化合物属于芳基硼酸酯类衍生物，具有硼原子与苯环共轭的结构特征，频哪醇酯基团赋予其良好的空气稳定性和溶解性，可溶于常见有机溶剂如二氯甲烷、THF 和乙醚。

2. 生物化学功能与重要性

作为 Suzuki-Miyaura 偶联反应的关键中间体，该硼酸酯可通过钯催化与芳基卤化物高效偶联，构建碳-碳键。其分子中的溴和氟原子提供了双重修饰位点，在药物化学中常用于引入特定药效团或调节化合物脂溶性。硼原子的空 p 轨道使其能与生物分子中的羟基或氨基可逆结合，在蛋白酶抑制剂设计中具有潜在应用价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于医药研发和材料科学领域：

- 医药中间体：用于合成抗肿瘤、抗病毒药物的苯环骨架，如 EGFR 抑制剂类化合物
- 有机光电材料：作为构建共轭聚合物或小分子发光材料的硼源
- 化学探针开发：氟原子可增强化合物在 PET 成像中的示踪能力
- 不对称催化：手性配体的合成前体

4. 储存条件与使用建议

建议在惰性气体（如氩气）保护下密封保存，长期储存温度应低于 -20°C 。开封后需在干燥环境中快速分装，避免反复冻融。使用前建议通过核磁共振氢谱（ ^1H NMR）验证纯度，反应体系中需严格除氧，推荐以碳酸钾或磷酸钾作为碱基参与偶联反应。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，重金属含量 $< 10\text{ppm}$ 。需注意其遇水可能缓慢水解生成硼酸副产物。安全操作时应佩戴护目镜和防尘口罩，避免吸入粉尘或接触皮肤。如意外接触眼睛，需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合危险有机硼化合物处置规范。

（注：实际使用前请务必查阅最新版物质安全数据表 MSDS）