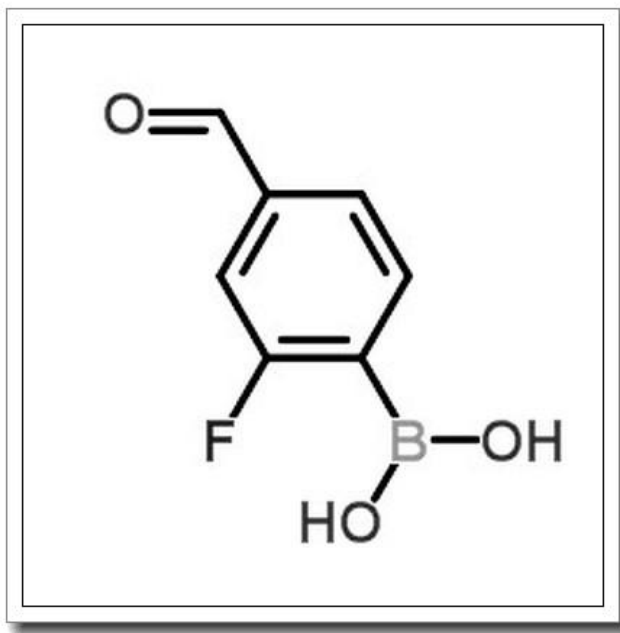


2-氟-4-甲酰基苯硼酸

(2-Fluoro-4-formylphenyl)boronic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	(2-Fluoro-4-formylphenyl)boronic acid
中文名称	2-氟-4-甲酰基苯硼酸
CAS 号	871126-22-6
分子式	C ₇ H ₆ BF ₀₃
分子量	167.93
纯度	>96%

产品说明

2-氟-4-甲酰基苯硼酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

2-氟-4-甲酰基苯硼酸 ((2-Fluoro-4-formylphenyl)boronic acid) 是一种含氟芳香族硼酸衍生物, 化学式为 $C_7H_6BF_3O_3$, 分子量 167.93。其结构同时包含硼酸基团 ($-B(OH)_2$) 和甲酰基 ($-CHO$), 赋予其独特的反应活性。CAS 号为 871126-22-6, 纯度 $\geq 96\%$, 常温下呈白色至类白色结晶粉末, 可溶于甲醇、乙醇等极性有机溶剂, 微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为硼酸类试剂的核心价值在于其硼酸基团与二醇类物质的特异性结合能力, 常用于糖类、核苷酸等生物分子的识别与检测。甲酰基的引入进一步扩展了其修饰潜力, 可通过缩合反应与氨基化合物形成希夫碱, 或参与点击化学偶联。氟原子的存在增强了分子稳定性和脂溶性, 使其在药物化学中作为关键中间体广泛应用。

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、抗癌药物的重要砌块, 尤其适用于 Suzuki-Miyaura 偶联反应构建含氟芳环结构。在材料科学中, 可用于制备荧光探针或高分子聚合物单体。分析化学领域则利用其与顺式二醇的特异性结合, 开发葡萄糖传感器或核酸检测试剂。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 $2-8^{\circ}C$ 避光干燥环境中, 长期储存需充惰性气体保护。使用时需在干燥惰性气氛 (如氮气) 下操作, 避免接触强氧化剂。溶解性测试表明, 推荐使用无水 DMSO 或 THF 配制母液 (浓度 ≤ 10 mM), 现配现用以防止水解。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 验证纯度 $\geq 96\%$, 水分含量 $\leq 0.5\%$, 重金属残留符合 ACS 标准。安全数据表明, 其急性毒性 (LD_{50}) 为 300 mg/kg (大鼠口服), 操作时需佩戴防护手

套及护目镜。若不慎接触皮肤，立即用大量清水冲洗。废弃物处理应遵守当地危险化学品管理条例。

注：具体实验方案建议结合目标反应体系进行优化，更多技术参数可索取 COA 报告。