

3-溴-2,6-二氟苯硼酸

(3-bromo-2,6-difluorophenyl)boronic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	(3-bromo-2,6-difluorophenyl)boronic acid
中文名称	3-溴-2,6-二氟苯硼酸
CAS 号	352535-84-3
分子式	C ₆ H ₄ BBrF ₂ O ₂
分子量	236.807
纯度	>96%

产品说明

3-溴-2,6-二氟苯硼酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3-溴-2,6-二氟苯硼酸 (英文名: (3-bromo-2,6-difluorophenyl)boronic acid) 是一种有机硼酸衍生物, 化学式为 $C_6H_4BBrF_2O_2$, 分子量 236.807, CAS 号为 352535-84-3。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 纯度 >96%, 具有苯环上溴原子和氟原子的双重取代特性, 同时含有硼酸基团, 使其在交叉偶联反应中表现出高反应活性。其结构中的卤素和硼酸基团为后续官能团化提供了重要位点。

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, 该化合物能够与芳基卤化物或烯炔卤化物在钯催化剂作用下形成碳-碳键, 广泛应用于复杂分子构建。其分子中的溴原子可进一步参与亲核取代反应, 而硼酸基团则赋予其与多种 electrophiles 反应的能力, 在药物化学和材料科学中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于医药中间体合成、有机光电材料开发及配体设计。在抗肿瘤药物和抗菌剂研发中, 可作为构建含二氟苯基结构单元的砌块; 在 OLED 材料领域, 用于合成具有特定发光性能的共轭分子。此外, 其还可作为金属有机框架 (MOF) 或共价有机框架 (COF) 的修饰前体。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 $-20^{\circ}C$ 惰性气体 (如氩气) 环境中, 避免光照和湿气。开封后需在干燥箱中操作, 防止硼酸基团水解。反应体系中需严格除氧, 建议搭配钯催化剂 (如 $Pd(PPh_3)_4$) 及碱性条件 (如 Na_2CO_3) 使用。溶解性测试表明其在 THF、DMSO 中溶解性良好。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 >96%, 残留溶剂符合 ICH 标准。操作时需佩戴防护手套及

护目镜，避免吸入粉尘或接触皮肤。MSDS 数据显示其具有刺激性，遇明火可能释放有毒气体（如 HBr、HF）。废弃物应按照危险化学品规范处置。

（注：本说明基于现有实验数据编制，具体应用需结合用户工艺条件优化。）