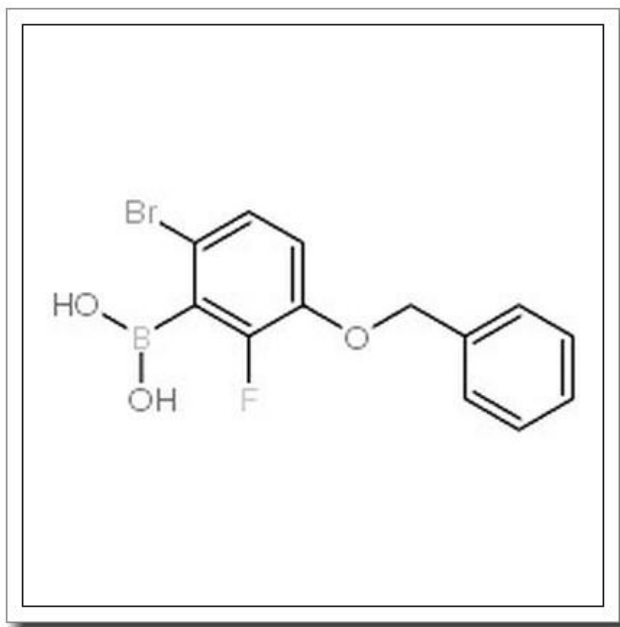


3-苄氧基-6-溴-2-氟苯硼酸

3-Benzyloxy-6-bromo-2-fluorophenylboronic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-Benzyloxy-6-bromo-2-fluorophenylboronic acid
中文名称	3-苄氧基-6-溴-2-氟苯硼酸
CAS 号	957035-10-8
分子式	C13H11BrF03
分子量	324.938
纯度	>96%

产品说明

3-苄氧基-6-溴-2-氟苯硼酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3-苄氧基-6-溴-2-氟苯硼酸 (CAS 号: 957035-10-8) 是一种有机硼酸衍生物, 分子式为 $C_{13}H_{11}BrFO_3$, 分子量为 324.938。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 纯度高于 96%, 具有硼酸基团 ($-B(OH)_2$) 的典型反应活性, 同时含有苄氧基、溴和氟取代基, 赋予其独特的电子效应和空间位阻特性。其结构中的硼酸基团可作为 Suzuki-Miyaura 偶联反应的关键中间体。

2. 生物化学功能与重要性

作为芳基硼酸类化合物, 该产品在过渡金属催化交叉偶联反应中表现出高效的选择性和反应活性。氟原子的引入增强了其脂溶性和代谢稳定性, 而溴原子提供了进一步功能化修饰的位点。这些特性使其在药物化学和材料科学中成为构建复杂芳环结构的重要砌块, 尤其适用于靶向药物分子和光电材料的合成。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于医药研发和有机合成领域。在药物化学中, 常用于抗肿瘤、抗感染等小分子药物的结构修饰; 在材料科学中, 可作为有机发光二极管 (OLED) 或液晶材料的中间体。其典型应用包括: Suzuki 偶联反应制备联芳基化合物、作为蛋白酶抑制剂的合成前体, 以及用于氟代芳烃类化合物的衍生化研究。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 、干燥惰性气体 (如氩气) 保护下避光保存, 长期储存需置于真空密封容器中。使用时需在干燥环境下操作 (如手套箱), 避免接触水分或强氧化剂。溶解性测试表明, 该化合物易溶于四氢呋喃 (THF) 和二甲基亚砜 (DMSO), 微溶于甲醇, 不溶于水。反应体系中建议添加适量碱 (如碳酸钾) 以稳定硼酸基团。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和 NMR 严格检测, 确保纯度 $\geq 96\%$ 。安全数据表明, 其可能对眼睛、皮肤和呼吸系统造成刺激, 操作时应佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩。若不

慎接触，需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地危险化学品法规，避免直接排放至环境。

（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进一步验证。）