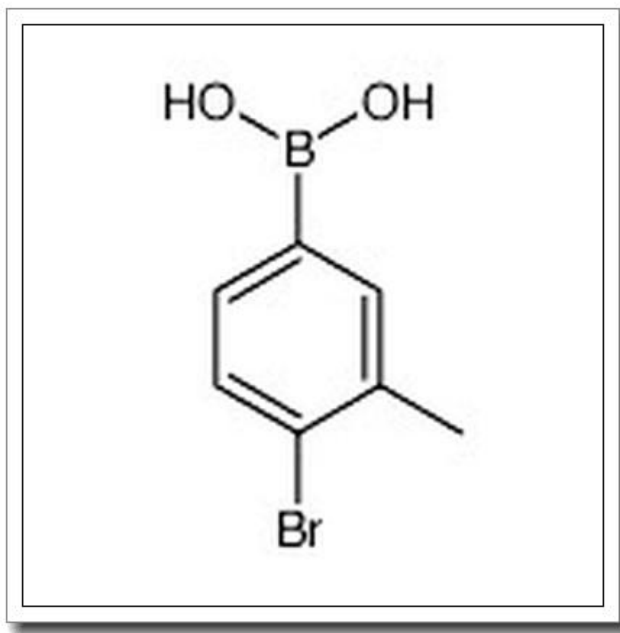


4-溴-3-甲基苯硼酸

(4-Bromo-3-methylphenyl)boronic acid



产品基本信息

| 属性 | 值 |
|-------|--------------------------------------|
| 化学名称 | (4-Bromo-3-methylphenyl)boronic acid |
| 中文名称 | 4-溴-3-甲基苯硼酸 |
| CAS 号 | 221006-67-3 |
| 分子式 | C7H8BrO2 |
| 分子量 | 214.852 |
| 纯度 | >96% |

产品说明

4-溴-3-甲基苯硼酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

4-溴-3-甲基苯硼酸 ((4-Bromo-3-methylphenyl)boronic acid) 是一种有机硼化合物, 化学式为 $C_7H_8BBrO_2$, 分子量为 214.852。该化合物为白色至类白色结晶粉末, CAS 号为 221006-67-3, 纯度通常高于 96%。其结构中的硼酸基团 ($-B(OH)_2$) 和溴原子赋予其独特的反应活性, 使其成为有机合成中的重要中间体。该化合物在常温下稳定, 但需避免潮湿环境以防止水解。

2. 生物化学功能与重要性

作为苯硼酸类衍生物, 4-溴-3-甲基苯硼酸在 Suzuki-Miyaura 偶联反应中表现出高效催化活性, 能够与芳基卤化物或烯烃形成碳-碳键。其溴取代基进一步扩展了修饰位点的多样性, 使其在药物化学和材料科学中具有重要价值。此外, 硼酸基团还可与生物分子中的二醇结构可逆结合, 在糖类或核苷酸检测领域有潜在应用。

3. 主要应用领域与具体用途

该化合物广泛应用于医药、农药及功能材料研发领域。在药物合成中, 常用于构建含溴芳环的活性分子骨架, 如抗肿瘤或抗炎药物的中间体。在材料科学中, 可作为有机发光二极管 (OLED) 或液晶材料的合成前体。此外, 其硼酸特性也用于传感器开发, 例如葡萄糖检测试剂的制备。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于干燥、避光的惰性气体环境中, 储存温度 $2-8^{\circ}C$ 。长期存放需置于干燥器内, 避免与水分或氧化剂接触。使用时应在惰性气体保护下操作 (如氮气或氩气), 反应溶剂需严格脱水。实验人员应佩戴防护手套、护目镜, 并在通风橱中处理。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和核磁共振 (NMR) 验证纯度, 批次检测报告可随货提供。其急性毒性数据为 LD_{50} (大鼠口服) $>500\text{ mg/kg}$, 属于刺激性化学品, 接触皮肤或眼睛

需立即用大量清水冲洗。废弃物处理需符合当地环保法规，建议通过专业化学废弃物回收渠道处置。

（注：本说明基于当前科学认知，具体应用需结合实验条件优化。安全数据详见随附的 MSDS 文件。）