

[5-bromo-2-chloro-4-(trifluoromethyl)phenyl]boronic acid

产品图片未找到

产品基本信息

属性	值
化学名称	[5-bromo-2-chloro-4-(trifluoromethyl)phenyl]boronic acid
产品目录号	
CAS 号	1452574-71-8
分子式	C ₇ H ₄ BBrClF ₃ O ₂
分子量	303.269
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

[5-溴-2-氯-4-(三氟甲基)苯基]硼酸 ([5-bromo-2-chloro-4-(trifluoromethyl)phenyl]boronic acid) 是一种有机硼酸化合物，化学式为 $C_7H_4BrClF_3O_2$ ，分子量为 303.269。该化合物 CAS 号为 1452574-71-8，纯度高于 96%，是一种白色至类白色结晶粉末。其结构中包含溴、氯和三氟甲基等取代基，赋予其独特的电子效应和空间位阻特性，使其在有机合成和药物化学中具有重要价值。

2. 生物化学功能与重要性

作为硼酸类化合物，该产品在 Suzuki-Miyaura 偶联反应中表现出高反应活性，能够与芳基卤化物高效偶联，构建碳-碳键。三氟甲基的强吸电子效应可调节苯环的电子密度，增强硼酸基团的亲电性，从而提升其在交叉偶联反应中的效率。此外，溴和氯原子的存在为进一步官能团化提供了修饰位点，使其成为多功能合成砌块。

3. 主要应用领域与具体用途

该化合物广泛应用于医药中间体、材料科学和农药研发领域。在药物化学中，常用于合成含三氟甲基的活性分子，如抗炎、抗肿瘤和抗病毒药物。在材料科学中，可用于制备有机光电材料或液晶分子。此外，其作为关键中间体还可用于构建复杂杂环体系或高分子聚合物。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 下避光保存，置于干燥惰性气体（如氮气）环境中，以延长稳定性。使用时需在干燥手套箱或惰性气氛下操作，避免接触水分和空气，防止硼酸基团水解。溶解性测试表明，该产品易溶于四氢呋喃、二甲基亚砜等极性有机溶剂，但在水中溶解度较低。

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 $>96\%$ 。使用时需穿戴防护装备（手套、护目镜和实验服），避免吸入粉尘或皮肤接触。其安全数据表（SDS）显示，

该化合物可能对眼睛和呼吸道有刺激性，操作区域应保持通风。废弃物需按危险化学品规范处置，禁止直接排放至环境中。