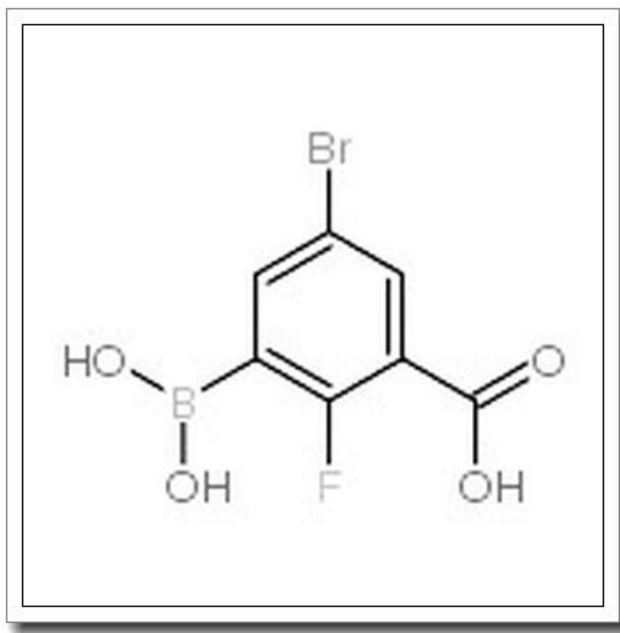


5-溴-3-羧基-2-氟苯硼酸

3-Borono-5-bromo-2-fluorobenzoic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-Borono-5-bromo-2-fluorobenzoic acid
中文名称	5-溴-3-羧基-2-氟苯硼酸
CAS 号	957120-63-7
分子式	C7H5BBrF04
分子量	262.826
纯度	>96%

产品说明

3-Borono-5-bromo-2-fluorobenzoic acid (5-溴-3-羧基-2-氟苯硼酸) 产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本品为白色至类白色结晶性粉末，化学式为 $C_7H_5BBrF_0_4$ ，分子量 262.826，CAS 登记号 957120-63-7。结构中含有苯硼酸基团、溴取代基及羧酸官能团，兼具芳香族化合物的稳定性和硼酸类化合物的反应活性。纯度经 HPLC 验证 $\geq 96\%$ ，易溶于极性有机溶剂（如 DMSO、甲醇），微溶于水。其特性使其成为有机合成中重要的中间体。

2. 生物化学功能与重要性

作为硼酸衍生物，该化合物可通过 Suzuki-Miyaura 偶联反应与卤代芳烃高效构建碳-碳键，广泛应用于药物分子和功能材料的合成。氟原子的引入增强了其电子效应，而溴原子提供了进一步官能团化的位点，在靶向药物设计和生物探针开发中具有独特价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于医药研发领域，特别是作为 EGFR 抑制剂、抗癌药物前体的关键合成砌块。在材料科学中，可用于制备有机发光二极管 (OLED) 的配体中间体。此外，其硼酸基团能与生物分子（如糖类、蛋白质）特异性结合，适用于生化传感器开发。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 $-20^{\circ}C$ 、干燥惰性气体环境中，避免光照及湿度影响。开封后需充氮保护，长期储存建议分装。使用时需在手套箱或通风橱中操作，避免吸入粉尘。溶解性测试推荐先以少量 DMSO 助溶，再稀释至所需浓度。

5. 质量控制与安全信息

批次产品均通过核磁共振 (1H NMR)、质谱 (MS) 及元素分析 (EA) 验证结构，

HPLC 检测杂质含量。本品对眼睛和皮肤有刺激性，操作时应佩戴护目镜、防化手套，接触后立即用大量清水冲洗。废弃物需按危险化学品规范处置。

（注：本说明基于现有研究数据，实际应用前请查阅最新文献并开展小试验证。）