

(6-bromo-2-ethoxy-3-fluoro-phenyl)boronic acid

产品图片未找到

产品基本信息

属性	值
化学名称	(6-bromo-2-ethoxy-3-fluoro-phenyl)boronic acid
产品目录号	
CAS 号	1310403-98-5
分子式	C ₈ H ₉ BBrF ₀₃
分子量	262.869
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

(6-溴-2-乙氧基-3-氟苯基)硼酸 (化学名称: (6-bromo-2-ethoxy-3-fluorophenyl)boronic acid) 是一种有机硼酸类化合物, 其 CAS 号为 1310403-98-5, 分子式为 $C_8H_9BBrFO_3$, 分子量为 262.869。该化合物纯度高于 96%, 具有明确的化学结构和稳定的理化性质。硼酸基团的存在使其在有机合成中表现出优异的反应活性, 尤其是作为 Suzuki-Miyaura 偶联反应的关键中间体。其结构中溴、乙氧基和氟的取代基进一步增强了其功能多样性, 适用于复杂分子的构建。

2. 生物化学功能与重要性

作为硼酸衍生物, 该化合物在过渡金属催化的交叉偶联反应中扮演重要角色, 能够高效形成碳-碳键。其分子中的卤素 (溴) 和吸电子基团 (氟) 可调节电子密度, 提升反应选择性和产率。此外, 硼酸基团的配位能力使其在药物化学和材料科学中具有广泛应用潜力, 特别是在靶向药物设计和功能材料合成领域。

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、有机光电材料研发及精细化工领域。在药物研发中, 常用于构建含氟或溴的活性分子骨架, 例如抗肿瘤和抗感染药物的先导化合物。在材料科学中, 可作为有机发光二极管 (OLED) 或液晶材料的关键原料。此外, 其高反应活性也适用于学术研究中的方法学开发。

4. 储存条件与使用建议

建议在干燥、避光条件下储存, 温度保持在 $2-8^{\circ}C$, 以延长稳定性。开封后需充入惰性气体 (如氮气) 保护, 避免吸湿或氧化。使用时应在通风橱中操作, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明, 该化合物易溶于极性有机溶剂 (如 DMF、DMSO), 推荐使用前通过薄层色谱 (TLC) 或核磁共振 (NMR) 验证纯度。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过高效液相色谱 (HPLC) 和质谱 (MS) 严格质量控制, 确保批次间一致性。安全数据表 (SDS) 显示其为刺激性化学品, 操作时需佩戴防护手套、护目镜

及实验服。若不慎接触眼睛或皮肤，应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置需符合当地环保法规，避免环境污染。