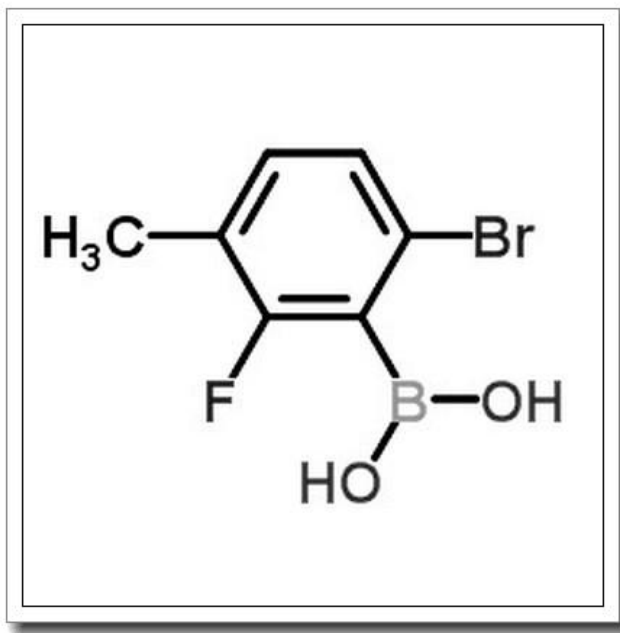


6-溴-2-氟-3-甲基苯硼酸

(6-Bromo-2-fluoro-3-methylphenyl)boronic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	(6-Bromo-2-fluoro-3-methylphenyl)boronic acid
中文名称	6-溴-2-氟-3-甲基苯硼酸
CAS 号	957061-15-3
分子式	C ₇ H ₇ BBrF ₀ O ₂
分子量	232.843
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

6-溴-2-氟-3-甲基苯硼酸 ((6-Bromo-2-fluoro-3-methylphenyl)boronic acid) 是一种有机硼酸化合物, CAS 号为 957061-15-3, 分子式为 $C_7H_7BrFO_2$, 分子量为 232.843。该化合物为白色至类白色结晶或粉末, 纯度通常高于 96%。其结构中包含溴、氟和硼酸基团, 使其在有机合成中表现出较高的反应活性, 尤其是作为 Suzuki 偶联反应的关键中间体。

2. 生物化学功能与重要性

作为苯硼酸衍生物, 该化合物在生物化学和药物化学中具有重要价值。硼酸基团能够与二醇类物质形成稳定的共价键, 因此在糖类识别和传感器开发中有潜在应用。此外, 其溴和氟取代基的引入可调节分子的电子效应和空间位阻, 使其成为设计药物分子或功能材料的理想构建模块。

3. 主要应用领域与具体用途

6-溴-2-氟-3-甲基苯硼酸广泛应用于医药、农药和材料科学领域。在药物研发中, 它常用于合成靶向抗癌药物或抗炎化合物的中间体。在材料科学中, 可用于制备有机发光二极管 (OLED) 或液晶材料的功能性单体。此外, 其作为 Suzuki 偶联反应的底物, 在复杂芳环体系的构建中发挥关键作用。

4. 储存条件与使用建议

该化合物需避光、密封保存于干燥环境中, 推荐储存温度为 2-8° C, 长期保存建议充入惰性气体 (如氮气)。使用时需在干燥惰性气氛 (如氩气) 下操作, 避免接触水分或强氧化剂。溶解性测试表明, 它易溶于四氢呋喃 (THF) 和二甲基亚砜 (DMSO), 但在水中溶解度较低。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过高效液相色谱 (HPLC) 和核磁共振 (NMR) 严格质量控制, 确保纯度 >96%。安全方面, 该化合物可能对眼睛、皮肤和呼吸系统造成刺激, 操作时应佩

戴防护手套、护目镜和防尘口罩。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环保法规，避免直接排放至环境中。