

6-溴-3-氯-2-氟苯硼酸

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



产品基本信息

属性	值
化学名称	(6-bromo-3-chloro-2-fluoro-phenyl)boronic acid
中文名称	6-溴-3-氯-2-氟苯硼酸
CAS 号	1451392-87-2
分子式	C ₆ H ₄ BBrClF ₀ 2
分子量	253.261
纯度	>96%

产品说明

6-溴-3-氯-2-氟苯硼酸产品说明

1. 产品概述与化学特性

6-溴-3-氯-2-氟苯硼酸（英文名称：(6-bromo-3-chloro-2-fluorophenyl)boronic acid）是一种有机硼酸类化合物，CAS 号为 1451392-87-2，分子式为 $C_6H_4BrClF_2$ ，分子量为 253.261。该化合物为白色至类白色结晶或粉末，纯度通常高于 96%。其结构中的硼酸基团（ $-B(OH)_2$ ）与卤素取代基（溴、氯、氟）使其在有机合成中表现出高反应活性，尤其适用于 Suzuki 偶联反应等交叉偶联反应。

2. 生物化学功能与重要性

作为芳基硼酸衍生物，6-溴-3-氯-2-氟苯硼酸在药物化学和材料科学中具有重要价值。硼酸基团可与多种官能团选择性反应，而卤素取代基（尤其是溴和氯）进一步增强了其作为中间体的多功能性。该化合物常用于构建复杂分子骨架，特别是在抗癌药物、激酶抑制剂和液晶材料的研发中发挥关键作用。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于以下领域：

- 药物研发：作为关键中间体用于合成靶向药物分子，如酪氨酸激酶抑制剂和抗肿瘤化合物。
- 材料科学：参与构建有机光电材料和高分子聚合物的功能性单体。
- 化学研究：在 Suzuki-Miyaura 偶联反应中作为芳基化试剂，高效构建碳-碳键。

4. 储存条件与使用建议

建议在干燥、避光条件下储存，温度控制在 2-8°C，并置于惰性气体（如氮气）保护下以延长稳定性。开封后需密封保存，避免吸湿或氧化。使用时需在通风橱中操作，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明，该化合物易溶于四氢呋喃（THF）和二甲基亚砜（DMSO），难溶于水。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和核磁共振 (NMR) 严格检测, 确保纯度 $\geq 96\%$ 。安全信息如下:

- 危险性: 可能对眼睛、皮肤和呼吸系统造成刺激。
- 防护措施: 操作时佩戴防护手套、护目镜和防尘口罩。
- 应急处理: 如接触皮肤, 立即用大量清水冲洗; 若误入眼睛, 需用生理盐水冲洗并就医。

本产品仅供科研用途, 不适用于医药或食品领域。建议使用者具备有机化学实验经验, 并严格遵守实验室安全规范。