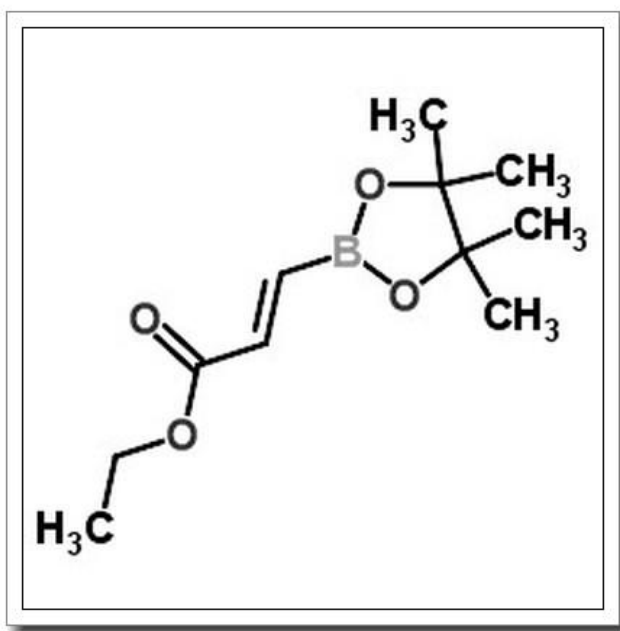


2-(乙氧羰基)乙烯基乙酸二甲基丁二醇酯

2-(Ethoxycarbonyl)vinylboronic acid pinacol ester



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-(Ethoxycarbonyl)vinylboronic acid pinacol ester
中文名称	2-(乙氧羰基)乙烯基乙酸二甲基丁二醇酯
CAS 号	1009307-13-4
分子式	C ₁₁ H ₁₉ B ₀₄
分子量	226.077
纯度	>96%

产品说明

2-(乙氧羰基)乙烯基乙酸二甲基丁二醇酯产品说明

1. 产品概述与化学特性

2-(乙氧羰基)乙烯基乙酸二甲基丁二醇酯 (CAS 号: 1009307-13-4) 是一种有机硼酸酯类化合物, 分子式为 $C_{11}H_{19}B_2O_4$, 分子量为 226.077。该化合物以硼酸酯为关键官能团, 同时含有乙烯基和乙氧羰基结构, 具有较高的反应活性。其纯度通常大于 96%, 外观为无色至淡黄色液体或固体, 具体形态取决于储存条件。该化合物在有机合成中表现出良好的稳定性, 尤其在 Suzuki 偶联反应中作为重要中间体。

2. 生物化学功能与重要性

作为一种硼酸酯衍生物, 该化合物在生物化学和药物化学领域具有重要价值。其乙烯基结构可参与多种亲电加成反应, 而硼酸酯基团则为过渡金属催化偶联反应提供了关键位点。在药物分子设计中, 它常用于构建含烯烃或芳环的活性片段, 尤其在抗癌、抗炎等小分子药物的研发中具有广泛应用。

3. 主要应用领域与具体用途

该化合物主要用于以下领域:

- 有机合成: 作为 Suzuki-Miyaura 偶联反应的关键底物, 用于构建碳-碳键, 合成复杂芳烃或杂环化合物。
- 药物研发: 作为中间体参与抗肿瘤、抗病毒等药物分子的合成, 例如用于制备 EGFR 抑制剂类化合物。
- 材料科学: 在功能高分子材料的合成中作为改性单体, 用于引入特定官能团。

4. 储存条件与使用建议

建议在惰性气体 (如氮气) 保护下密封储存, 温度控制在 2-8°C, 避免光照和潮湿环境。开封后应尽快使用, 剩余产品需重新充氮密封。使用时需在干燥环境下操作, 避免与强氧化剂或酸碱物质接触。溶解性测试表明, 该化合物易溶于 THF、二氯甲烷等有机溶剂, 但在水中稳定性较差。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测，纯度 $\geq 96\%$ ，并符合相关化学品标准。安全信息如下：

- 安全操作：需佩戴防护手套、护目镜，在通风橱中操作。
- 应急处理：如接触皮肤，立即用大量清水冲洗；若吸入，转移至空气新鲜处。
- 废弃物处理：按危险化学品规范处置，不可直接排入环境。

本产品仅供科研用途，不适用于临床或食品领域。具体实验方案需根据实际需求优化。