

2-(2-chloro-4-cyanophenyl)-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane

产品图片未找到

产品基本信息

属性	值
化学名称	2-(2-chloro-4-cyanophenyl)-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane
产品目录号	
CAS 号	945391-06-0
分子式	C ₁₃ H ₁₅ BClN ₂ O ₂
分子量	263.528
纯度	>96%

产品说明

产品名称: 2-(2-氯-4-氰基苯基)-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼杂环戊烷

产品目录号:

CAS 号: 945391-06-0

1. 产品概述与化学特性

本产品是一种有机硼化合物, 化学名称为 2-(2-氯-4-氰基苯基)-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼杂环戊烷, 分子式为 $C_{13}H_{15}BClN_2O_2$, 分子量为 263.528。其结构中含有苯环、氰基、氯原子以及二氧硼杂环戊烷基团, 纯度高于 96%。该化合物在常温下为白色至类白色固体, 具有良好的化学稳定性和反应活性, 尤其在 Suzuki-Miyaura 偶联反应中表现出优异的性能。

2. 生物化学功能与重要性

作为一种重要的硼酸酯衍生物, 该化合物在有机合成中常作为关键中间体使用。其硼酸酯基团能够与卤代烃或芳基卤化物发生交叉偶联反应, 广泛应用于碳-碳键的形成。此外, 氰基和氯原子的存在使其成为药物分子和功能材料合成中的重要砌块, 尤其在抗癌药物和光电材料的研发中具有潜在应用价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药、农药和材料科学领域。在医药研发中, 它可作为合成靶向药物的中间体; 在农药化学中, 用于构建含硼杂环的活性分子; 在材料科学中, 可用于制备有机发光二极管 (OLED) 和液晶材料。此外, 它还可作为有机合成中的硼试剂, 用于复杂分子的构建和修饰。

4. 储存条件与使用建议

建议将本品密封保存于干燥、阴凉的环境中, 避免与湿气和空气长期接触。储存温度为 2-8°C, 以延长其稳定性。使用时需在惰性气体 (如氮气或氩气) 保护下操作, 防止硼酸酯基团水解。溶解时建议使用无水有机溶剂 (如四氢呋喃或二甲基亚砜)。

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）进行质量控制，确保纯度高于 96%。安全信息方面，本品对眼睛、皮肤和呼吸道有刺激性，操作时应佩戴防护手套、护目镜和防尘口罩。若不慎接触，应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物需按照当地法规处理，避免环境污染。