

2-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)benzoic acid

产品图片未找到

产品基本信息

属性	值
化学名称	2-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)benzoic acid
产品目录号	
CAS 号	1187591-17-8
分子式	C ₁₃ H ₁₇ B ₀₄
分子量	248.083
纯度	>96%

产品说明

2-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼杂环戊烷-2-基)苯甲酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 2-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)benzoic acid, CAS 号 1187591-17-8, 分子式 C₁₃H₁₇B₀₄, 分子量 248.083。其结构包含苯甲酸骨架与二氧硼杂环戊烷基团，纯度经 HPLC 验证大于 96%。该化合物在常温下稳定，易溶于有机溶剂如 DMSO 和甲醇，微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为硼酸酯类衍生物，该化合物具有独特的硼原子配位能力，可作为 Suzuki-Miyaura 交叉偶联反应的关键中间体。其苯甲酸基团赋予分子两亲性，适用于药物分子修饰和生物共轭反应。在蛋白酶抑制剂设计和荧光探针合成中表现出显著的应用潜力。

3. 主要应用领域与具体用途

- 3.1 医药研发：用于构建靶向抗癌药物的硼酸基团载体，尤其在蛋白酶体抑制剂开发中作用突出。
- 3.2 材料科学：作为有机发光二极管（OLED）材料的合成前体。
- 3.3 化学生物学：标记生物分子以研究蛋白质-配体相互作用。
- 3.4 催化化学：参与构建 C-C 键的过渡金属催化反应体系。

4. 储存条件与使用建议

- 4.1 储存：建议密封保存于 -20° C 干燥环境中，避免光照与湿气，惰性气体保护可延长稳定性。
- 4.2 使用：操作时需在通风橱中进行，溶解建议使用无水 DMSO，工作浓度需通过预实验优化。
- 4.3 运输：常温运输需附加干燥剂，长期运输建议冷链处理。

5. 质量控制与安全信息

- 5.1 质量控制：批次检测包括 HPLC 纯度分析、核磁共振氢谱验证及水分含量测

定。

5.2 安全数据：根据 GHS 分类，该产品可能造成眼睛刺激（类别 2B），操作时应佩戴护目镜和防尘口罩。

5.3 废弃物处理：需作为有害化学品处置，不可直接排入下水道。

本产品仅供科研用途，不适用于诊断或治疗。使用者应具备有机化学实验资质并查阅最新版 MSDS 获取详细安全指引。