

# 2-(5,5-dimethyl-1,3,2-dioxaborinan-2-yl)-3-methoxybenzotrile

产品图片未找到

## 产品基本信息

属性	值
化学名称	2-(5,5-dimethyl-1,3,2-dioxaborinan-2-yl)-3-methoxybenzotrile
产品目录号	
CAS 号	883898-97-3
分子式	C13H16BN03
分子量	245.082
纯度	>96%

## 产品说明

### 2-(5,5-二甲基-1,3,2-二氧硼杂环己烷-2-基)-3-甲氧基苯甲腈产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

本产品为高纯度有机硼化合物，化学名称为 2-(5,5-二甲基-1,3,2-二氧硼杂环己烷-2-基)-3-甲氧基苯甲腈，CAS 号为 883898-97-3，分子式  $C_{13}H_{16}BN_3O_3$ ，分子量 245.082。其结构包含稳定的二氧硼杂环己烷骨架及甲氧基苯甲腈官能团，常温下呈白色至类白色结晶粉末，纯度 >96%。该化合物在有机溶剂如 DMSO、甲醇中具有良好溶解性，但对湿度敏感，需避免暴露于空气中。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为硼酸酯类衍生物，该化合物在 Suzuki-Miyaura 偶联反应中表现出高效催化活性，其硼杂环结构可增强反应稳定性。甲氧基与氰基的协同作用使其成为医药中间体设计中的关键模块，尤其在激酶抑制剂和抗肿瘤药物研发中具有重要价值。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于以下领域：

- 3.1 医药研发：作为 EGFR 抑制剂、PARP 抑制剂等小分子药物的核心合成砌块。
- 3.2 材料科学：用于构建含硼光电材料的前驱体。
- 3.3 化学合成：作为交叉偶联反应的硼酸酯试剂，适用于复杂芳环体系的构建。

#### 4. 储存条件与使用建议

推荐在  $-20^{\circ}C$ 、惰性气体（如氩气）保护下密封保存，开封后需充氮气后重新密封。使用前需平衡至室温以避免结露，建议在干燥手套箱中操作。溶解时优先选用无水 DMSO，配制溶液需现配现用。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 验证纯度 >96%，MS 及 NMR 谱图确认结构。操作时需佩戴防护手套及护目镜，避免吸入粉尘。如接触皮肤，立即用大量清水冲洗。化学废弃物应按照危险有机物规范处置。安全数据表（SDS）可随货提供或联系供应商获取。

注：本产品仅限科研用途，不适用于临床或食品领域。