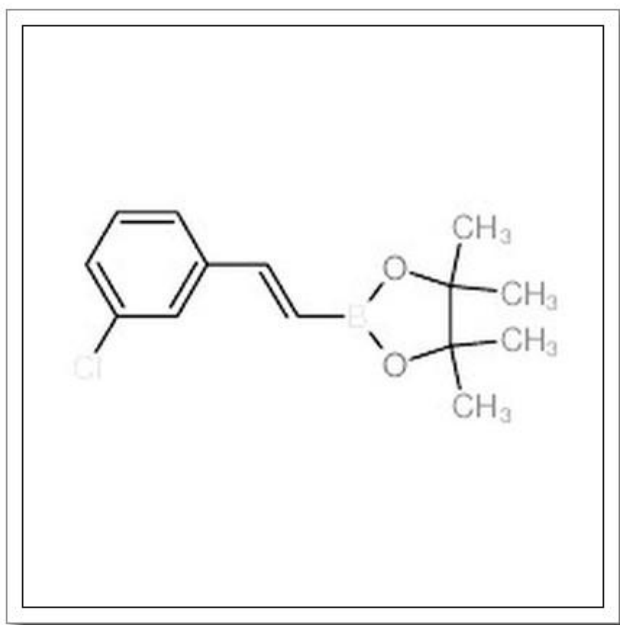


2-(E-2-(3-氯苯基)乙烯基)-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二噁硼烷

2-[(E)-2-(3-chlorophenyl)ethenyl]-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-[(E)-2-(3-chlorophenyl)ethenyl]-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane
中文名称	2-(E-2-(3-氯苯基)乙烯基)-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二噁硼烷
CAS 号	871125-84-7
分子式	C ₁₄ H ₁₈ BClO ₂
分子量	264.556
纯度	>96%

产品说明

2-[(E)-2-(3-氯苯基)乙烯基]-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二噁硼烷产品说明书

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-[(E)-2-(3-chlorophenyl)ethenyl]-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane，CAS 号 871125-84-7，分子式 C₁₄H₁₈BClO₂，分子量 264.556。其结构中含有一个乙烯基连接的 3-氯苯基团与四甲基二噁硼烷环，E 式构型明确，纯度经 HPLC 验证大于 96%。该化合物在常温下稳定，易溶于有机溶剂如二氯甲烷、THF 和乙醚，微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为硼酸酯类衍生物，该化合物是 Suzuki-Miyaura 交叉偶联反应的关键中间体，能够高效参与碳-碳键形成反应。其乙烯基硼酸酯结构在过渡金属催化下可与芳基卤化物发生偶联，广泛应用于复杂分子构建。此外，3-氯苯基的引入可调节产物的电子效应与空间位阻，在药物化学中具有特殊价值。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发和材料科学领域：

- 医药中间体：用于合成含氯苯基结构的靶向药物分子，如激酶抑制剂和抗炎化合物。
- 有机光电材料：作为构建共轭聚合物或小分子发光材料的核心单元。
- 学术研究：在金属有机化学中作为配体或反应底物，探索新型催化体系。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 -20° C 惰性气体（如氩气）环境中，避免光照与湿气。开封后需在干燥箱中操作，防止硼酸酯水解。使用前建议通过氮气保护下的重结晶或柱色谱法进一步纯化。反应体系中需严格除氧，推荐以 Pd(PPh₃)₄ 或 SPhos 预催化剂配合使用。

5. 质量控制与安全信息

本产品经核磁共振（¹H NMR、¹³C NMR）、质谱（HRMS）及 HPLC 多批次验证，杂质含量符合科研级标准。安全数据：

- 危害提示：可能引起皮肤刺激（H315）和眼睛损伤（H318），操作时需佩戴护目镜与丁腈手套。
- 应急处理：接触皮肤后立即用肥皂水冲洗，若吸入粉尘需转移至通风处。
- 废弃物处置：按危险有机硼废物处理，避免直接排放至环境中。

注：本说明仅针对科研用途，不适用于临床或工业量产。具体实验方案需结合文献优化。