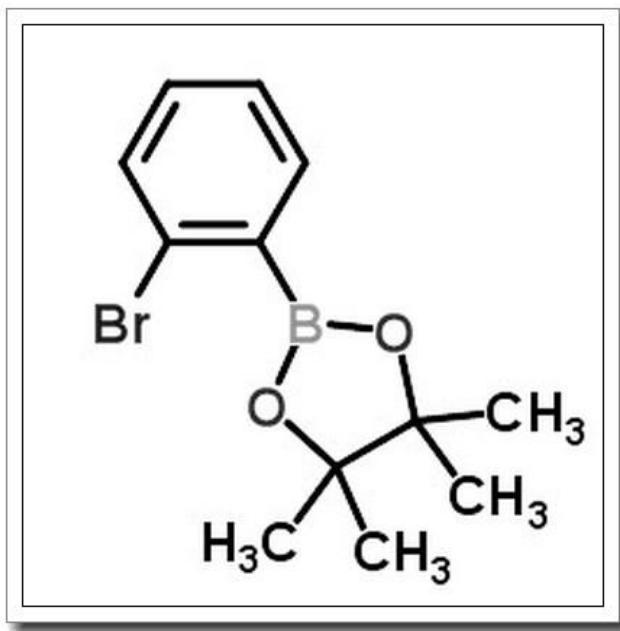


2-溴苯硼酸频哪醇酯

2-(2-Bromophenyl)-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-(2-Bromophenyl)-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane
中文名称	2-溴苯硼酸频哪醇酯
CAS 号	269410-06-2
分子式	C ₁₂ H ₁₆ BBrO ₂
分子量	282.969
纯度	>96%

产品说明

2-(2-溴苯基)-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼杂环戊烷产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 2-(2-Bromophenyl)-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane, 中文名称为 2-溴苯硼酸频哪醇酯, CAS 号为 269410-06-2。其分子式为 C₁₂H₁₆BBrO₂, 分子量为 282.969, 纯度标准>96%。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 属于有机硼酸酯类衍生物, 具有频哪醇硼酯的特征结构, 在空气中相对稳定, 但对湿度敏感。

2. 生物化学功能与重要性

作为 Suzuki-Miyaura 偶联反应的关键中间体, 该硼酸酯可通过钯催化与芳基卤化物高效偶联, 构建碳-碳键。其分子中的溴原子与硼酸酯基团共存, 使其兼具亲电和亲核反应活性, 在复杂分子合成中表现出独特价值。此外, 硼酸酯基团的引入可显著提高化合物的水溶性和代谢稳定性, 在药物化学中具有广泛应用潜力。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于医药中间体、有机光电材料及配体合成领域。具体用途包括: 抗肿瘤药物分子砌块的合成; OLED 材料中芳香环结构的修饰; 作为金属催化反应的配体前体。在学术研究中, 常用于开发新型 C-C 偶联方法学, 或作为探针分子研究硼酸酯类化合物的反应机理。

4. 储存条件与使用建议

建议在惰性气体保护下密封储存, 温度控制在 2-8°C, 相对湿度低于 40%。开封后需在干燥氮气环境中分装使用。使用时应避免接触强氧化剂及酸碱物质, 反应体系需严格除氧除水。建议在通风橱中操作, 并佩戴防尘口罩与化学防护手套。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC、NMR 及元素分析进行批次质量控制, 确保纯度>96%。安全数据表明, 该化合物可能引起眼睛和皮肤刺激, 吸入或食入有害。应急处理需参照 GHS 分

类: P261 避免吸入粉尘, P305+P351+P338 如进入眼睛需立即用大量清水冲洗。废弃物应作为危险化学品处置, 符合当地环保法规要求。

注: 具体实验方案建议结合文献方法优化反应条件, 本说明书中数据仅供参考。