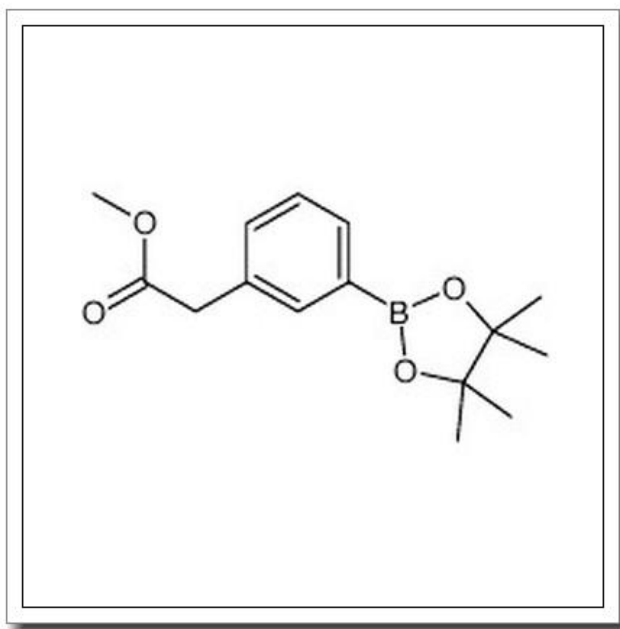


3-(2-甲氧基-2-氧代乙基)苯硼酸频那醇酯

3-(2-Methoxy-2-oxoethyl)phenylboronic acid, pinacol ester



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-(2-Methoxy-2-oxoethyl)phenylboronic acid, pinacol ester
中文名称	3-(2-甲氧基-2-氧代乙基)苯硼酸频那醇酯
CAS 号	478375-42-7
分子式	C ₁₅ H ₂₁ B ₀₄
分子量	276.136
纯度	>96%

产品说明

3-(2-甲氧基-2-氧代乙基)苯硼酸频那醇酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 3-(2-Methoxy-2-oxoethyl)phenylboronic acid, pinacol ester, CAS 号 478375-42-7, 分子式 $C_{15}H_{21}B_2O_4$, 分子量 276.136。纯度经 HPLC 验证 $\geq 96\%$ ，具有硼酸酯类化合物的典型特性，包括对湿气敏感性和在碱性条件下的稳定性。其结构中的频那醇酯基团可增强硼原子的亲电性，而甲氧羰基乙基侧链赋予分子一定的极性，使其在有机溶剂中具有良好的溶解性（如甲醇、乙醚）。

2. 生物化学功能与重要性

作为苯硼酸衍生物，该化合物在 Suzuki-Miyaura 偶联反应中表现出高效催化活性，能够与卤代芳烃形成碳-碳键。其分子设计通过频那醇酯保护硼酸基团，显著提高了储存稳定性和反应选择性，同时甲氧羰基的引入使其成为合成复杂药物中间体（如酪氨酸激酶抑制剂）的关键砌块。在糖类识别和蛋白质标记领域，其硼酸基团可特异性识别顺式二醇结构。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要应用于以下领域：

- 3.1 医药化学：作为抗肿瘤药物（如硼替佐米类似物）和糖尿病药物合成的中间体。
- 3.2 材料科学：用于制备有机电致发光材料（OLED）中的硼掺杂聚合物。
- 3.3 生化研究：作为荧光探针前体，标记细胞表面糖蛋白。
- 3.4 催化体系：与钯催化剂联用，实现芳基化合物的高效偶联。

4. 储存条件与使用建议

储存于惰性气体（如氩气）保护的密闭容器中，温度控制在 $-20^{\circ}C$ 至 $4^{\circ}C$ ，避免光照与湿度 $> 30\%$ 。使用前需在干燥箱中恢复至室温，建议反应体系严格除氧。溶解时优先选用无水 THF 或 DMF，浓度不超过 50 mM 以避免自聚。

5. 质量控制与安全信息

批次质检报告包含 HPLC 纯度 ($\geq 96\%$)、 ^1H NMR 结构验证及重金属残留 (< 10 ppm)。本品对眼睛和呼吸道有刺激性，操作需佩戴护目镜与防尘口罩，接触皮肤后立即用聚乙烯乙二醇冲洗。废弃物应按照国家有机硼化合物处置规范处理，避免强氧化剂接触。

(注：本说明基于现有研究数据，实际应用需结合具体实验条件验证。)