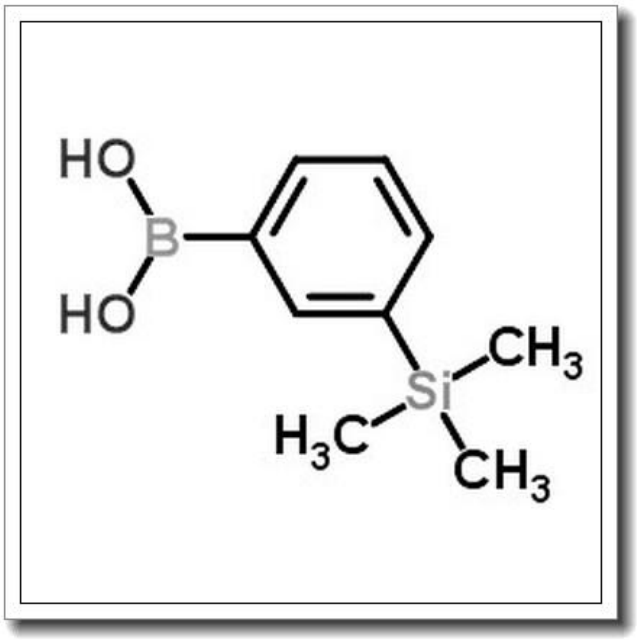
3-(三甲基硅烷基)苯硼酸

3-Trimethylsilylphenylboronic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-Trimethylsilylphenylboronic acid
中文名称	3-(三甲基硅烷基)苯硼酸
CAS 号	177171-16-3
分子式	C9H15BO2Si
分子量	194.111
纯度	>96%

产品说明

3-Trimethylsilylphenylboronic acid产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3-Trimethylsilylphenylboronic acid（3-三甲基硅烷基苯硼酸）是一种有机硼化合物，CAS号为177171-16-3，分子式为C9H15BO2Si，分子量194.111。该化合物由苯硼酸骨架与三甲基硅烷基（-SiMe3）修饰而成，兼具硼酸的反应活性和硅烷基的空间位阻效应。其纯度>96%，常温下为白色至类白色结晶粉末，可溶于常见有机溶剂如二氯甲烷、四氢呋喃等，但对湿气敏感，需避免水解。

2. 生物化学功能与重要性

作为苯硼酸衍生物，该化合物可通过硼酸酯化反应与二醇、糖类等生物分子特异性结合，同时三甲基硅烷基的引入增强了疏水性并调控电子效应，使其在催化反应中表现出独特的选择性。在药物化学中，硅烷基的位阻效应可定向阻断副反应，是构建复杂杂环骨架的关键中间体。

3. 主要应用领域与具体用途

3-三甲基硅烷基苯硼酸广泛应用于以下领域：

（1）有机合成：作为Suzuki-Miyaura偶联反应的硼酸试剂，用于构建芳基-芳基碳碳键；

（2）材料科学：合成含硅共轭聚合物，用于OLED发光层材料；

（3）药物研发：作为蛋白酶抑制剂或糖类识别分子的前体，例如抗糖尿病药物开发；

（4）分析化学：修饰色谱固定相以提升分离选择性。

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-20°C，避光防潮。使用前需在干燥环境下恢复至室温并短暂氮气冲洗。建议反应体系严格除水，搭配无水溶剂（分子筛预处理）及钯催化剂（如Pd(PPh3)4）以获得最佳偶联效率。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 验证纯度>96%，核磁共振（1H NMR、13C NMR）及质谱（MS）确认结构。安全数据：

（1）GHS 危害标识：H302（吞咽有害）、H315（皮肤刺激）、H319（眼刺激）；

（2）操作防护：佩戴防尘口罩、化学护目镜及丁腈手套；

（3）应急处理：接触皮肤时立即用肥皂水冲洗，眼部接触需用生理盐水持续冲洗 15 分钟并就医。

废弃物处置需符合当地法规，建议通过专业化学品回收公司处理。