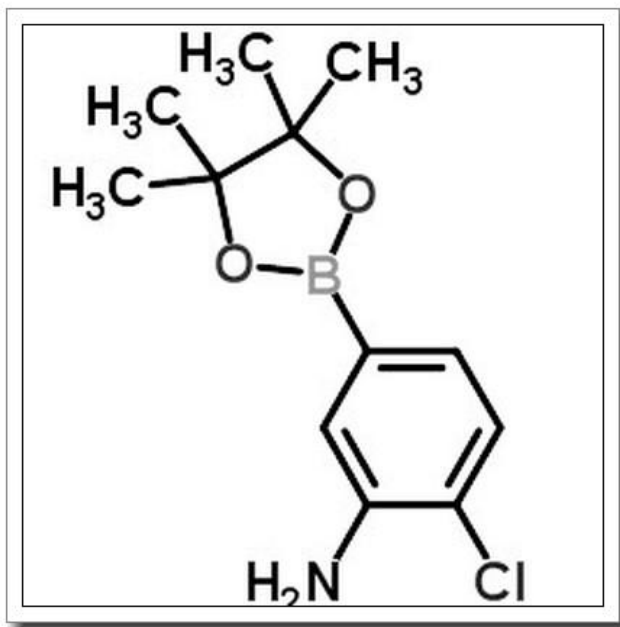


3-氨基-4-氯苯基硼酸频哪醇酯

2-Chloro-5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)aniline



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-Chloro-5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)aniline
中文名称	3-氨基-4-氯苯基硼酸频哪醇酯
CAS 号	850567-56-5
分子式	C ₁₂ H ₁₇ BClN ₂ O ₂
分子量	253.533
纯度	>96%

产品说明

2-Chloro-5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)aniline 产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 2-Chloro-5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)aniline, 中文名为 3-氨基-4-氯苯基硼酸频哪醇酯, CAS 号为 850567-56-5。其分子式为 C₁₂H₁₇BClN₀₂, 分子量为 253.533, 纯度大于 96%。该化合物为白色至类白色结晶粉末, 属于硼酸酯类衍生物, 具有频哪醇硼酸酯的典型结构特征, 苯环上的氯和氨基取代基赋予其独特的反应活性。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为硼酸酯类中间体, 在有机合成中表现出显著的偶联反应活性, 尤其是 Suzuki-Miyaura 交叉偶联反应。氨基和氯原子的存在使其成为构建复杂芳环结构的关键砌块, 广泛应用于药物化学和材料科学领域。其硼酸酯结构在生理条件下相对稳定, 适合作为生物活性分子的前体或探针。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发中, 本品常用于合成靶向药物分子, 尤其是激酶抑制剂和抗肿瘤化合物。在材料科学领域, 可用于制备有机发光二极管 (OLED) 的中间体或配体。此外, 其作为硼酸保护形式, 在多步合成中可避免游离硼酸的自偶联副反应, 提高反应选择性。

4. 储存条件与使用建议

建议在干燥、避光条件下储存, 温度控制在 2-8°C, 置于惰性气体 (如氩气) 环境中以保持稳定性。开封后需尽快使用, 避免反复冻融。使用时应在惰性气氛 (氮气或氩气) 下操作, 防止硼酸酯水解。溶解推荐使用无水 THF 或 DMSO 等极性非质子溶剂。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度, 并提供详细的质谱和核磁数据支持。操作时需佩戴防

护手套、护目镜及防尘口罩，避免吸入或皮肤接触。若不慎接触眼睛，应立即用大量清水冲洗并就医。化学废弃物应按照危险有机物规范处置。安全数据表（MSDS）可随货提供，包含完整的毒理学和生态学信息。

注：本说明基于现有研究数据编制，具体应用需结合实验条件优化。