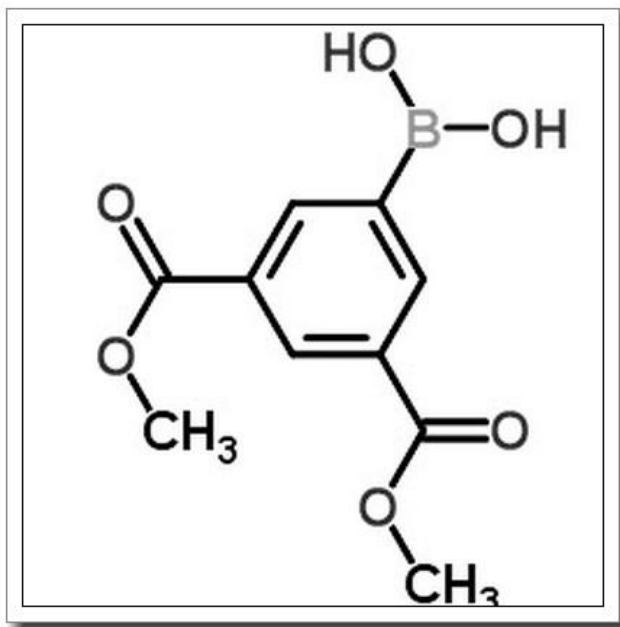


3,5-双(甲氧基羰基)苯硼酸

3,5-Bis(methoxycarbonyl)phenylboronic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	3,5-Bis(methoxycarbonyl)phenylboronic acid
中文名称	3,5-双(甲氧基羰基)苯硼酸
CAS号	177735-55-6
分子式	C ₁₀ H ₁₁ B ₀ O ₆
分子量	238.002
纯度	>96%

产品说明

3,5-双(甲氧基羰基)苯硼酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3,5-双(甲氧基羰基)苯硼酸 (英文名称: 3,5-Bis(methoxycarbonyl)phenylboronic acid) 是一种有机硼酸衍生物, CAS 号为 177735-55-6, 分子式为 $C_{10}H_{11}B_2O_6$, 分子量为 238.002。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 纯度高于 96%, 具有良好的化学稳定性和溶解性, 可溶于多种有机溶剂如二甲基亚砷 (DMSO) 和甲醇。其结构中的硼酸基团和甲氧基羰基赋予其独特的反应活性, 适用于多种偶联反应和官能团转化。

2. 生物化学功能与重要性

作为硼酸类化合物, 3,5-双(甲氧基羰基)苯硼酸在有机合成中扮演重要角色, 尤其是作为 Suzuki-Miyaura 偶联反应的关键中间体。硼酸基团可与卤代烃或芳基 triflate 发生交叉偶联, 构建碳-碳键, 广泛应用于药物分子和功能材料的合成。此外, 其甲氧基羰基可通过水解或氨解进一步衍生化, 扩展其在多肽修饰和聚合物化学中的应用潜力。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于医药研发、材料科学和精细化工领域。在医药领域, 常用于抗肿瘤药物和酶抑制剂的中间体合成; 在材料科学中, 可作为有机发光二极管 (OLED) 或液晶材料的构建单元。实验室中亦用于催化反应机理研究或作为标准品进行分析方法开发。

4. 储存条件与使用建议

建议在干燥、避光条件下储存, 温度保持在 2-8° C, 以延长产品稳定性。开封后需充入惰性气体 (如氮气) 密封保存, 避免吸湿或氧化。使用时需在通风橱中操作, 佩戴防护手套和护目镜。溶解推荐使用无水溶剂, 并在反应体系中严格控制水分含量以确保反应效率。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和核磁共振 (NMR) 严格检测, 确保纯度 $\geq 96\%$ 。安全数据表明, 该化合物可能对眼睛、皮肤和呼吸系统造成刺激, 操作时应避免直接接触。如不慎吸入或接触, 立即用大量清水冲洗并就医。废弃物需按危险化学品规范处置。

(注: 本说明书基于现有科学数据编写, 实际应用前请参阅最新文献或进行小试验证。)