

(4-Phenylnaphthalen-1-yl)boronic acid

产品图片未找到

产品基本信息

属性	值
化学名称	(4-Phenylnaphthalen-1-yl)boronic acid
产品目录号	
CAS 号	372521-91-0
分子式	C ₁₆ H ₁₃ B ₀₂
分子量	248.084
纯度	>96%

产品说明

(4-苯基萘-1-基)硼酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为(4-Phenyl-naphthalen-1-yl)boronic acid, CAS 号为 372521-91-0, 分子式为 C₁₆H₁₃B₂O₂, 分子量 248.084。该化合物为白色至类白色结晶粉末, 纯度经 HPLC 检测确认 >96%。作为芳基硼酸类化合物, 其结构中萘环 1 位与硼酸基团相连, 4 位连接苯基, 具有典型的硼酸酯化反应活性, 在空气中易吸潮, 需避光保存。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物是 Suzuki-Miyaura 偶联反应的关键中间体, 其硼酸基团可与卤代芳烃在钯催化剂作用下形成碳-碳键。这一特性使其成为构建联芳基结构的重要砌块, 在药物分子设计中尤为关键。其萘环结构赋予产物显著的平面性和刚性, 常用于调节药物分子的空间构象和电子分布。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发领域, 特别是作为激酶抑制剂类抗癌药物 (如 EGFR 抑制剂) 的合成前体。在材料科学中, 可用于制备有机电致发光材料 (OLED) 的中间体。具体用途包括:

- 抗肿瘤候选化合物的结构修饰
- 共轭高分子材料的单体合成
- 荧光探针分子的构建
- 不对称催化反应的配体开发

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C、惰性气体保护下长期储存, 短期使用可存放于 2-8° C 干燥器内。开封后需充氩气密封, 避免反复冻融。使用前建议真空干燥处理, 反应体系中需严格除氧, 推荐在 Schlenk 技术条件下操作。溶解性测试显示易溶于 THF、DMSO 等极性有机溶剂, 水溶液中需加入适量碱促进溶解。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC、NMR 和质谱三重验证，残留溶剂符合 USP 标准。安全数据表明该物质对眼睛和呼吸道有刺激性，操作时应佩戴护目镜和防尘口罩。不慎接触时需立即用大量清水冲洗，MSDS 建议在通风橱中处理。废弃物应作为有害化学品处置，避免直接排入下水系统。

（注：实际文档应包含完整的危险性符号、风险术语及安全措施图标，此处从略）