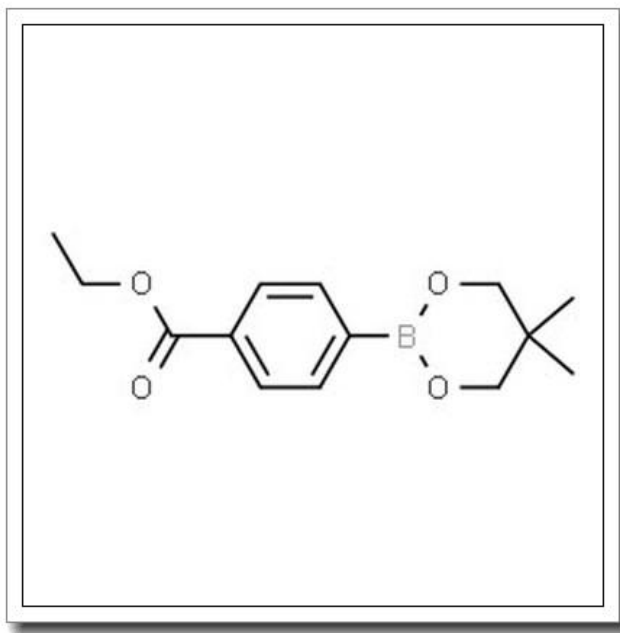


4-乙氧羰基苯硼酸新戊二醇酯

ethyl 4-(5,5-dimethyl-1,3,2-dioxaborinan-2-yl)benzoate



产品基本信息

属性	值
化学名称	ethyl 4-(5,5-dimethyl-1,3,2-dioxaborinan-2-yl)benzoate
中文名称	4-乙氧羰基苯硼酸新戊二醇酯
CAS 号	1192765-24-4
分子式	C ₁₄ H ₁₉ B ₀₄
分子量	262.11
纯度	>96%

产品说明

4-乙氧羰基苯硼酸新戊二醇酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 ethyl 4-(5,5-dimethyl-1,3,2-dioxaborinan-2-yl)benzoate, 是一种含硼杂环结构的芳香酸酯类化合物。其分子式为 C₁₄H₁₉B₀O₄, 分子量 262.11, CAS 登记号 1192765-24-4。该化合物以白色至类白色结晶粉末形式存在, 纯度经 HPLC 检测确认 ≥96%, 具有典型的硼酸酯特征吸收峰 (红外光谱中 B-O 键伸缩振动位于 1340-1310 cm⁻¹)。其结构中包含稳定的五元二氧硼杂环 (5,5-二甲基-1,3,2-二氧硼杂环己烷) 与苯甲酸乙酯基团, 赋予其良好的有机溶剂溶解性和空气稳定性。

2. 生物化学功能与重要性

作为 Suzuki-Miyaura 交叉偶联反应的关键中间体, 该硼酸酯可通过钯催化与卤代芳烃高效偶联, 构建 C-C 键。其环状硼酸酯结构相较于传统硼酸, 显著降低了水解敏感性, 同时保持了高反应活性。在生物共轭化学中, 该化合物可通过酯基水解进一步衍生化, 用于荧光标记物或靶向药物载体的合成。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于以下领域:

- 3.1 医药研发: 作为构建 EGFR 抑制剂、PARP 抑制剂等小分子药物的硼酸酯前体
- 3.2 材料科学: 用于合成有机电致发光材料 (OLED) 的共轭单体
- 3.3 化学生物学: 作为蛋白质标记探针的硼酸功能化模块
- 3.4 催化剂开发: 在过渡金属催化体系中作为配体组分

4. 储存条件与使用建议

- 4.1 储存条件: 建议密封保存于 -20°C 惰性气体 (如氩气) 环境中, 避免吸湿和光照
- 4.2 溶解特性: 易溶于 THF、DMSO、二氯甲烷等有机溶剂, 水溶性 < 0.1 mg/mL

(25°C)

4.3 操作建议: 实验过程中需在干燥氮气保护下称量, 反应体系应严格除氧

5. 质量控制与安全信息

5.1 质量控制: 批次纯度通过 HPLC (C18 柱, 乙腈/水梯度洗脱) 和 $^1\text{H NMR}$ (CDC13, δ 1.35-1.39 ppm 处特征三重峰) 双重验证

5.2 安全数据: 根据 GHS 分类, 该产品属于刺激性物质 (皮肤刺激类别 2), 操作时应佩戴护目镜和丁腈手套

5.3 废弃物处理: 含硼废弃物需按危险化学品处理规范收集, 建议使用 10% 氢氧化钠溶液淬灭后交由专业机构处置

本产品仅限科研用途, 不适用于临床或食品领域。具体应用前请查阅最新文献并开展小试实验验证。