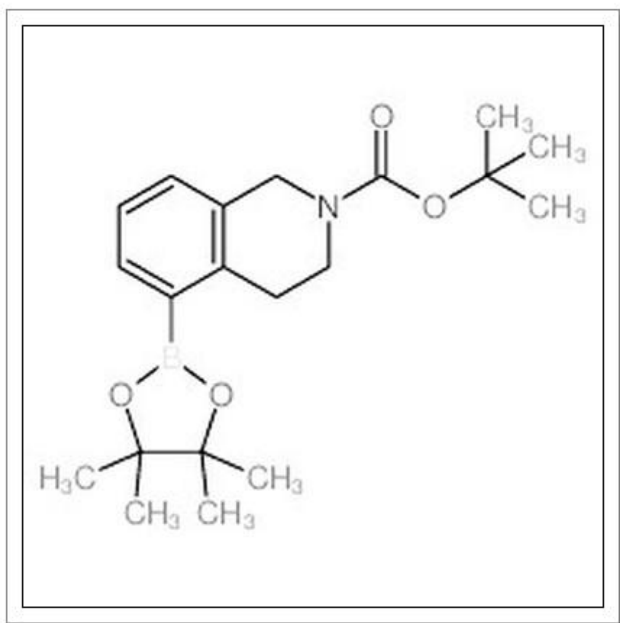


5-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二噁硼烷-2-基)-3,4-二氢异喹啉-2(1h)-羧酸叔丁酯

tert-Butyl 5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-3,4-dihydroisoquinoline-2(1H)-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-Butyl 5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-3,4-dihydroisoquinoline-2(1H)-carboxylate
中文名称	5-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二噁硼烷-2-基)-3,4-二氢异喹啉-2(1h)-羧酸叔丁酯
CAS 号	1035235-26-7
分子式	C ₂₀ H ₃₀ BN ₀ O ₄
分子量	359.268
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 5-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二噁硼烷-2-基)-3,4-二氢异喹啉-2(1H)-羧酸叔丁酯，CAS 号为 1035235-26-7，分子式为 C₂₀H₃₀BN₂O₄，分子量为 359.268。其结构中含硼酸酯基团和叔丁氧羰基保护基，具有良好的化学稳定性和反应活性。纯度经 HPLC 验证大于 96%，适用于高精度合成反应。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物是重要的有机硼试剂，在 Suzuki-Miyaura 偶联反应中作为关键中间体，能够高效构建碳-碳键。其硼酸酯基团在温和条件下可水解为硼酸，进一步参与交叉偶联反应。叔丁氧羰基 (Boc) 保护基的存在增强了分子在酸性环境中的稳定性，使其在复杂分子合成中具有独特优势。

3. 主要应用领域与具体用途

本品广泛应用于医药研发和材料科学领域。在药物化学中，用于合成含异喹啉骨架的活性分子，如抗肿瘤和中枢神经系统药物候选化合物。在材料领域，可作为有机光电材料的构建模块。典型用途包括：过渡金属催化偶联反应的底物、多肽固相合成中的保护基载体、以及硼酸探针的制备原料。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C、干燥惰性气体（如氩气）保护下避光保存，开封后需充氮密封。使用前需恢复至室温并避免接触水分。溶解性测试表明，本品易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂，微溶于醇类。实验操作应在通风橱中进行，建议使用玻璃或聚四氟乙烯容器。

5. 质量控制与安全信息

批次产品均通过核磁共振 (1H NMR、13C NMR)、质谱 (MS) 和高效液相色谱 (HPLC) 三重验证。安全数据表明，本品对眼睛和皮肤有轻微刺激性，操作时需佩

戴防护手套和护目镜。如意外接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应按照危险化学品处理规范处置，避免与强氧化剂共存。

注：本说明基于现有实验数据编制，具体应用需结合用户实际工艺条件验证。