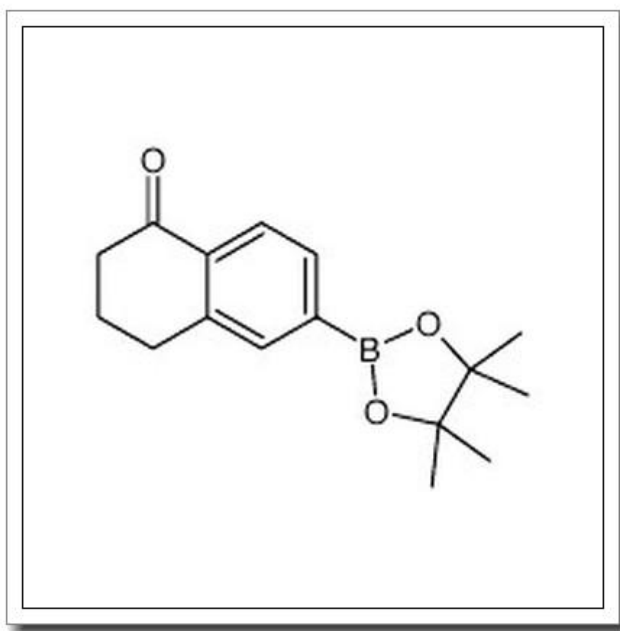


6-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-3,4-dihydro-2H-naphthalen-1-one

6-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-3,4-dihydro-2H-naphthalen-1-one



产品基本信息

属性	值
化学名称	6-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-3,4-dihydro-2H-naphthalen-1-one
中文名称	6-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-3,4-dihydro-2H-naphthalen-1-one
CAS 号	517874-22-5
分子式	C ₁₆ H ₂₁ B ₀₃
分子量	272.147
纯度	>96%

产品说明

6-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼杂环戊烷-2-基)-3,4-二氢-2H-萘-1-酮产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为高纯度有机硼化合物，化学名称 6-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-3,4-dihydro-2H-naphthalen-1-one, CAS 号 517874-22-5, 分子式 C₁₆H₂₁B₀₃, 分子量 272.147。其结构特征为萘酮骨架与保护性二氧硼杂环戊烷基团的结合，赋予其优异的稳定性和反应活性。常温下呈白色至类白色结晶粉末，纯度>96% (HPLC 测定)，易溶于常见有机溶剂如二氯甲烷、四氢呋喃等。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为关键硼酸酯中间体，在 Suzuki-Miyaura 偶联反应中表现出高效催化活性，能够与卤代芳烃形成碳-碳键。其分子中的硼酸酯基团在生理 pH 条件下具有可控水解特性，使其成为药物研发中靶向递送系统的理想载体。此外，萘酮结构单元赋予其潜在的光敏性和电子传输能力，在材料科学领域具有特殊价值。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发领域，本品常用于构建抗癌药物分子骨架，特别是用于激酶抑制剂和 PARP 抑制剂的合成。材料科学中，可作为有机发光二极管 (OLED) 和共轭聚合物的前驱体。实验室研究中，主要用于：

- 过渡金属催化交叉偶联反应的底物
- 硼酸探针标记化合物的合成
- 多环芳烃衍生物的结构修饰

4. 储存条件与使用建议

建议在惰性气体（如氩气）保护下密封保存，长期储存温度应低于-20℃，短期使用可存放于 2-8℃干燥环境。开封后需立即充氮保护，避免接触湿气。使用时需在干燥惰性气氛（手套箱或 Schlenk 线）中操作，溶剂需严格脱水。建议现配现用，水溶液体系应在 pH 7.4 缓冲液中稳定化处理。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC、NMR 和质谱三重验证，批次间一致性误差<2%。安全数据表明其急性毒性（LD50）为 1200 mg/kg（大鼠口服），操作时应佩戴化学防护手套和护目镜。若接触皮肤，立即用大量清水冲洗 15 分钟。废弃物处理需符合危险有机硼化合物处置规范，建议通过专业化学品回收公司处理。

（注：本说明书技术参数基于当前批次检测结果，具体应用需根据实验条件优化。更多技术资料可索取 COA 和 MSDS 文件。）