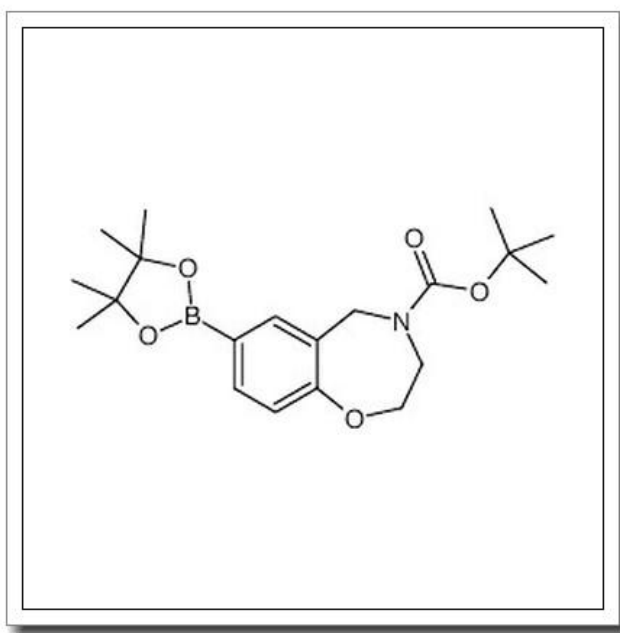


7-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二噁硼烷-2-基)-2,3-二氢-1,4-苯并 x 氮杂卓-4(5h)-羧酸叔丁酯

tert-butyl 7-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-3,5-dihydro-2H-1,4-benzoxazepine-4-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-butyl 7-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-3,5-dihydro-2H-1,4-benzoxazepine-4-carboxylate
中文名称	7-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二噁硼烷-2-基)-2,3-二氢-1,4-苯并 x 氮杂卓-4(5h)-羧酸叔丁酯
CAS 号	1256784-52-7
分子式	C ₂₀ H ₃₀ BN ₀ O ₅
分子量	375.267

纯度	>96%
----	------

产品说明

产品说明

1. 产品概述与化学特性

7-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二噁硼烷-2-基)-2,3-二氢-1,4-苯并 x 氮杂卓-4(5h)-羧酸叔丁酯 (CAS 号: 1256784-52-7) 是一种有机硼化合物, 分子式为 C₂₀H₃₀BN₅O₅, 分子量为 375.267。该化合物以叔丁酯保护的形式存在, 并含有四甲基二氧硼烷基团, 使其在有机合成中具有较高的反应活性。其纯度通常大于 96%, 适用于高要求的化学与生物化学研究。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为硼酸酯衍生物, 在 Suzuki-Miyaura 偶联反应中表现出优异的性能, 是构建复杂有机分子的重要中间体。其结构中的苯并 x 氮杂卓骨架在药物化学中具有广泛的应用潜力, 可用于开发中枢神经系统药物、抗抑郁剂及抗焦虑药物等。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于医药研发和有机合成领域, 具体用途包括:

- 作为关键中间体用于合成具有生物活性的苯并 x 氮杂卓类化合物。
- 在过渡金属催化的偶联反应中作为硼酸酯供体, 构建碳-碳键。
- 用于高通量筛选和药物先导化合物的优化研究。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C 下避光保存, 置于干燥、惰性气体 (如氮气) 环境中, 以避免吸湿和氧化。使用时应在干燥的惰性气氛 (如氩气或氮气) 下操作, 并避免与强氧化剂或强酸接触。溶解时推荐使用无水有机溶剂, 如二甲基亚砜 (DMSO) 或四氢呋喃 (THF)。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和 NMR 严格检测, 确保纯度大于 96%。使用时需佩戴适当的防护装备, 如手套、护目镜和实验服, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。如不慎接触, 应

立即用大量清水冲洗，并寻求医疗帮助。该化合物可能对水环境有害，需按照当地法规妥善处理废弃物。