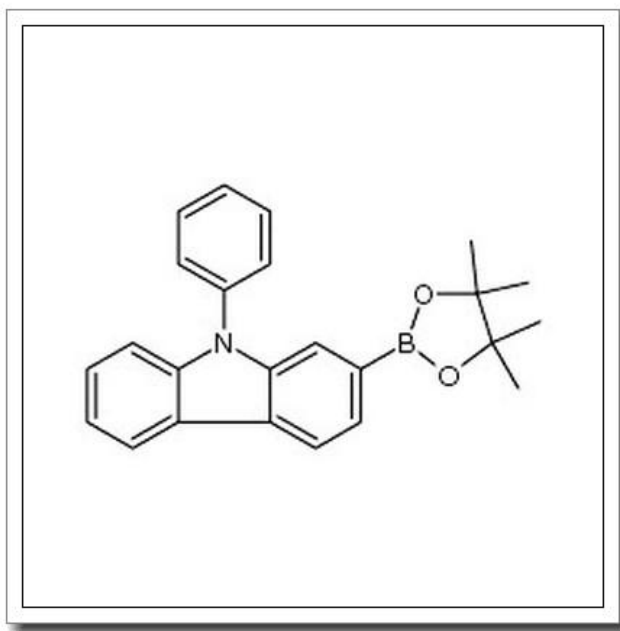


## 9-苯基咔唑-2-硼酸频哪醇酯

*9H- Carbazole, 9- phenyl- 2- (4, 4, 5, 5- tetramethyl- 1, 3, 2- dioxaborolan- 2- yl)*



### 产品基本信息

属性	值
化学名称	9H- Carbazole, 9- phenyl- 2- (4, 4, 5, 5- tetramethyl- 1, 3, 2- dioxaborolan- 2- yl)
中文名称	9-苯基咔唑-2-硼酸频哪醇酯
CAS 号	1246669-45-3
分子式	C <sub>24</sub> H <sub>24</sub> BN <sub>2</sub> O <sub>2</sub>
分子量	369.264
纯度	>96%

## 产品说明

9H-咔唑-9-苯基-2-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼杂环戊烷-2-基)产品说明书

### 1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 9H-Carbazole, 9-phenyl-2-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl), 中文名为 9-苯基咔唑-2-硼酸频哪醇酯, CAS 号为 1246669-45-3。其分子式为 C<sub>24</sub>H<sub>24</sub>BN<sub>2</sub>O<sub>2</sub>, 分子量为 369.264, 纯度标准 >96%。该化合物为白色至淡黄色结晶粉末, 具有硼酸酯特有的稳定性, 在常温下对空气和湿度敏感, 需惰性气体保护保存。其结构中的咔唑基团赋予其显著的共轭特性, 而硼酸频哪醇酯基团则提供了高效的偶联反应活性。

### 2. 生物化学功能与重要性

作为有机硼酸酯衍生物, 本产品在 Suzuki-Miyaura 偶联反应中表现出高反应活性, 是构建碳-碳键的关键中间体。咔唑骨架的刚性平面结构使其在光电材料领域具有独特优势, 可显著提升材料的载流子迁移率和热稳定性。此外, 其硼酸酯基团在生物探针和药物分子设计中常用于靶向修饰, 尤其在蛋白酶抑制剂开发中具有潜在应用价值。

### 3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要应用于以下领域:

- 3.1 有机合成: 作为 Suzuki 偶联反应的硼酸酯试剂, 用于合成联芳基化合物及复杂芳香体系。
- 3.2 光电材料: 作为 OLED 发光层、空穴传输材料的核心单体, 用于制备高性能显示器件。
- 3.3 医药研发: 作为激酶抑制剂或抗癌药物的前体化合物, 参与结构优化与活性筛选。
- 3.4 科研试剂: 在金属有机框架 (MOFs) 和共价有机框架 (COFs) 的构建中作为功能化砌块。

#### 4. 储存条件与使用建议

储存条件：需在-20° C 以下、惰性气体（如氩气或氮气）保护的密闭容器中避光保存，开封后建议分装使用以避免反复冻融。

使用建议：

- 4.1 反应前需在无水无氧条件下解冻，建议使用手套箱操作。
- 4.2 与钯催化剂联用时，推荐添加适量磷酸钾作为碱以提高偶联效率。
- 4.3 溶解性测试表明，其在 THF、DMSO 中溶解性良好 (>50 mg/mL)，水溶液中易水解。

#### 5. 质量控制与安全信息

质量控制：通过 HPLC 检测纯度>96%，核磁共振（<sup>1</sup>H NMR、<sup>13</sup>C NMR）和质谱（HRMS）验证结构一致性，残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。

安全信息：

- 5.1 安全标识：GHS07（刺激性），避免吸入粉尘或接触皮肤。
- 5.2 应急处理：如接触眼睛，立即用大量清水冲洗并就医。
- 5.3 废弃物处置：按危险有机硼化合物处理，不可直接排入下水道。

本产品仅供科研用途，不适用于临床或食品领域。使用前请查阅最新版材料安全数据表（MSDS）并采取适当防护措施。