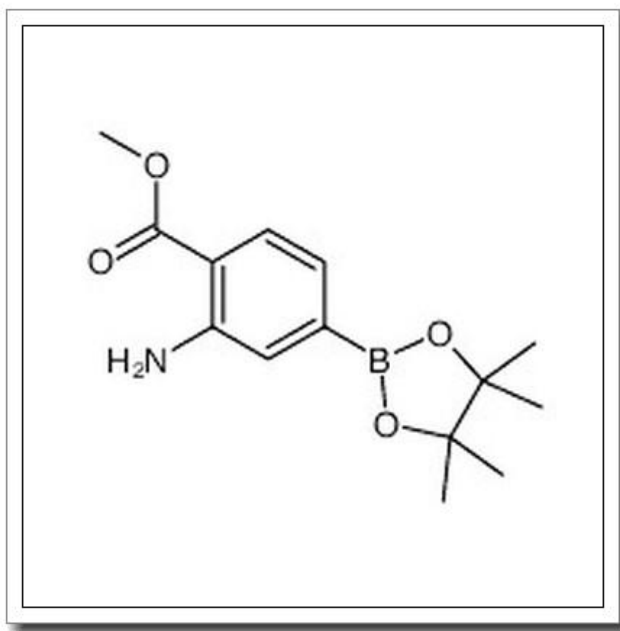


methyl 2-amino-4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)benzoate

methyl 2-amino-4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)benzoate



产品基本信息

属性	值
化学名称	methyl 2-amino-4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)benzoate
中文名称	methyl 2-amino-4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)benzoate
CAS 号	1198615-60-9
分子式	C ₁₄ H ₂₀ BN ₀₄
分子量	277.124
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

甲基 2-氨基-4-(4, 4, 5, 5-四甲基-1, 3, 2-二氧硼杂环戊烷-2-基) 苯甲酸酯 (CAS 号: 1198615-60-9) 是一种含硼有机化合物, 分子式为 $C_{14}H_{20}BN_2O_4$, 分子量为 277.124。该化合物以白色至浅黄色结晶或粉末形式存在, 纯度通常高于 96%。其结构中的硼酸酯基团和氨基苯甲酸酯基团使其在有机合成和药物化学中具有独特的反应活性。该化合物具有良好的溶解性, 可溶于常见有机溶剂如二甲基亚砜 (DMSO)、甲醇和乙腈, 但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

作为一种硼酸酯衍生物, 该化合物在 Suzuki-Miyaura 偶联反应中表现出优异的性能, 能够作为关键中间体参与碳-碳键的形成。其氨基和硼酸酯基团的协同作用使其在构建复杂分子骨架时具有高度选择性, 尤其在药物分子和功能材料的合成中不可或缺。此外, 其稳定的硼酸酯结构可有效避免游离硼酸的自缩合问题, 提高了反应的效率和产率。

3. 主要应用领域与具体用途

该化合物广泛应用于医药研发、材料科学和有机合成领域。在医药领域, 它常用于合成靶向药物分子, 尤其是激酶抑制剂和抗肿瘤药物的中间体。在材料科学中, 它可作为有机发光二极管 (OLED) 和液晶材料的构建单元。此外, 在学术研究中, 它也被用于开发新型硼酸酯探针和生物标记物。

4. 储存条件与使用建议

建议将产品密封保存于干燥、避光的环境中, 温度控制在 $2-8^{\circ}C$ 以延长稳定性。开封后应避免长时间暴露于空气中, 以防吸湿或降解。使用时需在惰性气体 (如氮气或氩气) 保护下操作, 特别是在无水无氧条件下进行反应。建议佩戴防护手套、护目镜和实验服, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过高效液相色谱 (HPLC) 和核磁共振 (NMR) 严格检测, 确保纯度高于

96%。安全数据表明，该化合物可能对眼睛、皮肤和呼吸系统造成刺激，操作时应遵循化学品通用防护规范。如不慎接触，应立即用大量清水冲洗，并寻求医疗帮助。废弃物需按照当地法规处理，避免对环境造成污染。