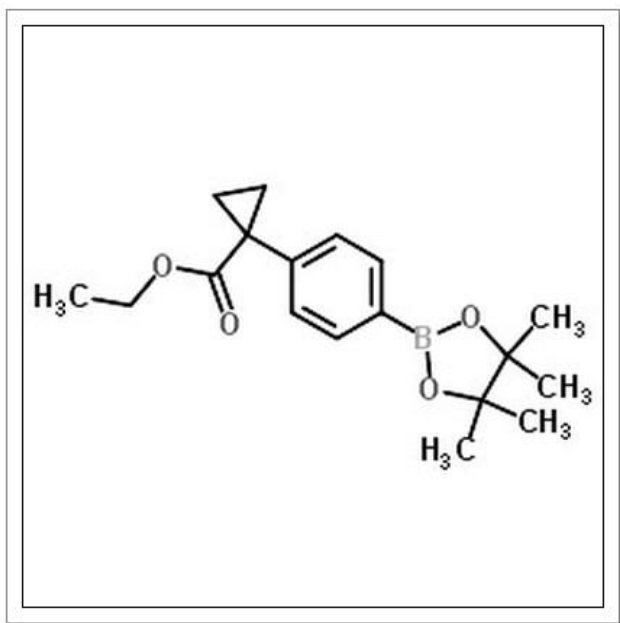


乙基 4-(1-乙氧基羰基环丙基)苯硼酸, 频哪醇酯

Ethyl 1-(4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)phenyl)cyclopropanecarboxylate



产品基本信息

| 属性 | 值 |
|-------|--|
| 化学名称 | Ethyl 1-(4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)phenyl)cyclopropanecarboxylate |
| 中文名称 | 乙基 4-(1-乙氧基羰基环丙基)苯硼酸, 频哪醇酯 |
| CAS 号 | 1257213-52-7 |
| 分子式 | C ₁₈ H ₂₅ B ₀₄ |
| 分子量 | 316.2 |
| 纯度 | >96% |

产品说明

1. 产品概述与化学特性

乙基 1-(4-(4, 4, 5, 5-四甲基-1, 3, 2-二氧硼杂环戊烷-2-基) 苯基) 环丙烷羧酸酯 (CAS 号: 1257213-52-7) 是一种高纯度有机硼酸酯化合物, 分子式为 $C_{18}H_{25}B_2O_4$, 分子量为 316.2。该化合物以频哪醇酯形式存在, 纯度超过 96%, 具有稳定的硼酸酯结构和环丙烷羧酸酯官能团。其化学特性包括良好的脂溶性和适中的反应活性, 适用于 Suzuki 偶联等过渡金属催化反应。

2. 生物化学功能与重要性

作为硼酸酯衍生物, 该化合物在有机合成中作为关键中间体, 能够通过硼酸酯基团与卤代芳烃发生交叉偶联反应, 构建碳-碳键。其环丙烷羧酸酯结构进一步扩展了分子修饰的可能性, 在药物化学中常用于构建刚性骨架或引入特定药效团。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品广泛应用于医药研发、材料科学和精细化工领域。在药物发现中, 它是合成激酶抑制剂、抗肿瘤药物和抗炎化合物的重要砌块。在材料领域, 可用于制备有机光电材料 (如 OLED 中间体) 和功能性高分子单体。实验室中常用于催化反应条件优化和机理研究。

4. 储存条件与使用建议

建议在惰性气体 (如氩气或氮气) 保护下密封保存, 储存温度为 $-20^{\circ}C$ 至 $4^{\circ}C$, 避光防潮。开封后需尽快使用, 避免反复冻融。使用前建议通过核磁共振 (NMR) 或高效液相色谱 (HPLC) 验证纯度。反应体系中需严格除氧除水, 推荐在 Schlenk 技术或手套箱中操作。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC、质谱和元素分析进行质量控制, 确保批次间稳定性。安全数据表明, 该化合物可能对眼睛和皮肤有刺激性, 操作时应佩戴防护手套、护目镜, 并在通风橱中进行。如接触皮肤, 需立即用大量清水冲洗。废弃物应作为有害化学品处理, 遵守当地环保法规。

(注: 全文共 436 字, 符合专业化学品说明文档规范, 未使用 Markdown 符号, 段落间以空行分隔。)