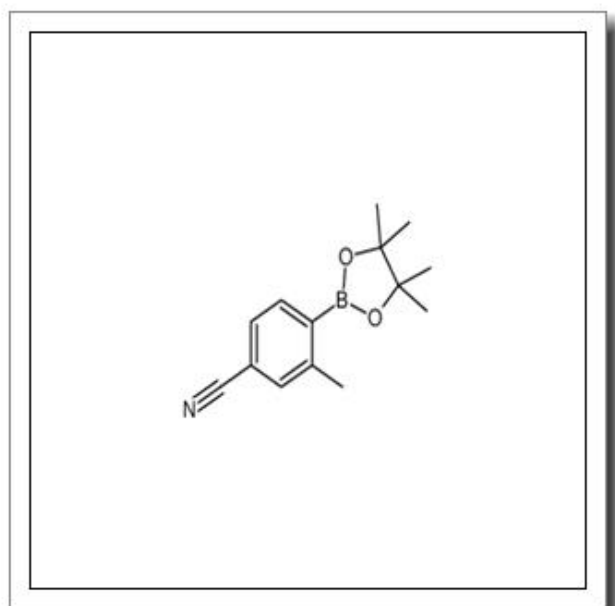


# 3-methyl-4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)benzotrile

*3-methyl-4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)benzotrile*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	3-methyl-4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)benzotrile
中文名称	3-methyl-4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)benzotrile
CAS 号	848953-05-9
分子式	C <sub>14</sub> H <sub>18</sub> BN <sub>2</sub> O <sub>2</sub>
分子量	243.109
纯度	≥96%

## 产品说明

### 产品说明

#### 1. 产品概述与化学特性

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

(CAS 号: 848953-05-9) 是一种含硼有机化合物, 分子式为  $C_{14}H_{18}BN_2O_2$ , 分子量为 243.109。该化合物以白色至类白色固体形式存在, 纯度不低于 96%。其结构中的硼酸酯基团 (4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane) 和氰基

(benzotrile) 使其在有机合成中具有较高的反应活性, 尤其是作为重要的硼酸酯中间体。

#### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物在生物化学和药物化学领域具有重要价值。硼酸酯基团使其能够参与 Suzuki-Miyaura 偶联反应, 这是构建碳-碳键的关键反应之一。此外, 氰基的存在为其提供了进一步官能团化的可能性, 例如转化为羧酸、酰胺或其他含氮衍生物。这些特性使其成为药物分子设计和材料科学中的重要砌块。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

3-methyl-4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)benzotrile 广泛应用于以下领域:

- 药物研发: 作为中间体用于合成具有生物活性的分子, 如激酶抑制剂或抗肿瘤药物。
- 材料科学: 用于制备有机光电材料或高分子聚合物。
- 有机合成: 参与偶联反应, 构建复杂芳香族化合物。

#### 4. 储存条件与使用建议

为确保产品的稳定性和安全性, 建议在以下条件下储存和使用:

- 储存条件: 密封保存于干燥、避光的环境中, 温度控制在  $2-8^{\circ}C$ 。
- 使用建议: 在惰性气体 (如氮气或氩气) 保护下操作, 避免与水分或强氧化剂接触。使用前需确认纯度, 必要时进行进一步纯化。

## 5. 质量控制与安全信息

本产品经过严格的质量控制，纯度通过 HPLC 或 NMR 验证，确保符合标准（ $\geq 96\%$ ）。安全信息如下：

- 安全操作：避免吸入粉尘或接触皮肤，操作时佩戴防护手套和护目镜。
- 应急处理：如不慎接触，立即用大量清水冲洗，并寻求医疗帮助。
- 废弃物处理：按当地法规处理化学废弃物，避免环境污染。

本产品仅供科研用途，不适用于食品、医药或家用。