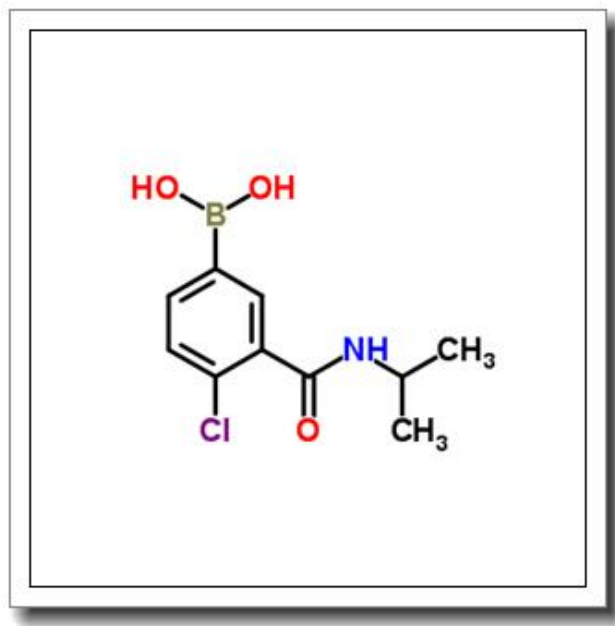


4-氯-3-(异丙基氨甲酰基)苯基硼酸

4-Chloro-3-(Isopropylcarbamoyl)Phenylboronic Acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-Chloro-3-(Isopropylcarbamoyl)Phenylboronic Acid
中文名称	4-氯-3-(异丙基氨甲酰基)苯基硼酸
CAS 号	871332-74-0
分子式	C ₁₀ H ₁₃ BClN ₁ O ₃
分子量	241.479
纯度	≥ 96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

4-氯-3-(异丙基氨甲酰基)苯基硼酸 (4-Chloro-3-(Isopropylcarbamoyl)Phenylboronic Acid) 是一种有机硼酸衍生物, CAS 号为 871332-74-0, 分子式为 $C_{10}H_{13}BClN_2O_3$, 分子量为 241.479。该化合物以白色至类白色固体形式存在, 纯度通常不低于 96%。其结构中的硼酸基团和氯取代基使其在有机合成中表现出较高的反应活性, 尤其是作为 Suzuki-Miyaura 偶联反应的关键中间体。

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。硼酸基团能够与二醇类物质形成稳定的共价键, 因此在糖类识别和传感器开发中有潜在应用。此外, 其异丙基氨甲酰基结构可能参与氢键相互作用, 增强与生物大分子的结合能力, 使其成为药物设计中的候选片段。

3. 主要应用领域与具体用途

4-氯-3-(异丙基氨甲酰基)苯基硼酸主要用于医药中间体和材料科学的合成。具体用途包括:

- 作为 Suzuki-Miyaura 偶联反应的底物, 用于构建联芳基结构, 常见于抗癌药物和抗炎药物的研发。
- 在有机发光二极管 (OLED) 材料合成中作为功能化单体。
- 作为蛋白酶抑制剂的修饰基团, 用于优化药物分子的活性和选择性。

4. 储存条件与使用建议

该化合物需在干燥、避光条件下储存, 建议温度为 2-8° C, 并置于惰性气体 (如氮气) 环境中以延长稳定性。使用时需在通风橱中操作, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解时可选用极性有机溶剂 (如二甲基亚砜或甲醇), 但需注意溶剂纯度以避免副反应。

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）验证纯度，确保批次一致性。安全信息如下：

- 可能对眼睛、皮肤和呼吸道产生刺激，操作时需佩戴防护手套、护目镜和口罩。
- 如不慎接触，立即用大量清水冲洗并就医。
- 废弃物应按照当地法规处理，避免环境污染。

以上信息仅供参考，具体实验方案需结合实际情况调整。