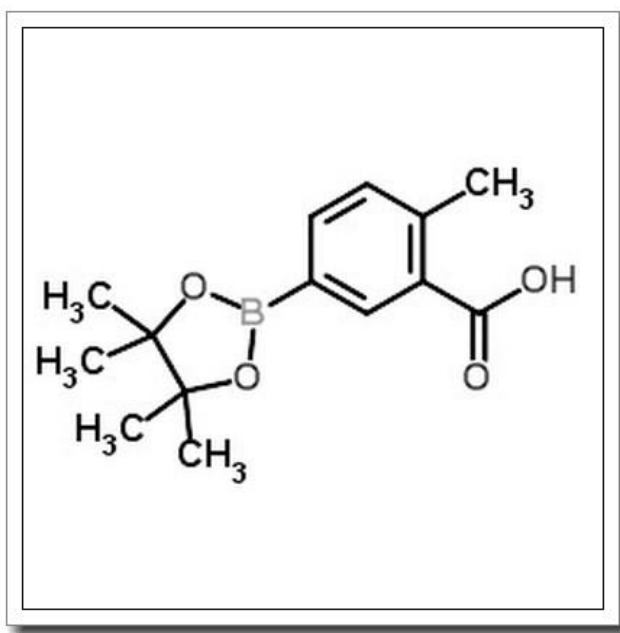


## 2-Methyl-5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)benzoic acid

*2-Methyl-5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)benzoic acid*



### 产品基本信息

属性	值
化学名称	2-Methyl-5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)benzoic acid
中文名称	2-Methyl-5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)benzoic acid
CAS 号	1431542-21-0
分子式	C <sub>14</sub> H <sub>19</sub> B <sub>04</sub>
分子量	262.109
纯度	>96%

## 产品说明

### 2-甲基-5-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼杂环戊烷-2-基)苯甲酸产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

本产品为高纯度有机硼酸衍生物，化学名称为 2-甲基-5-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼杂环戊烷-2-基)苯甲酸，CAS 号为 1431542-21-0。其分子式为 C<sub>14</sub>H<sub>19</sub>B<sub>04</sub>，分子量 262.109，常温下呈白色至类白色结晶粉末。该化合物结构中含苯甲酸基团与硼酸酯保护基团（频哪醇硼酸酯），使其兼具羧酸的反应活性与硼酸酯的稳定性，纯度经 HPLC 验证 ≥96%。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为 Suzuki-Miyaura 交叉偶联反应的关键中间体，其硼酸酯基团可与卤代芳烃在钯催化下高效构建碳-碳键。苯甲酸基团进一步提供羧酸官能团修饰位点，在药物分子设计中常用于引入氢键结合位点或调节脂溶性。该化合物在 PROTAC linker 合成、激酶抑制剂开发等领域具有特殊价值。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

- 3.1 医药研发：用于合成靶向抗癌药物（如 BTK 抑制剂）的硼酸类前体化合物。
- 3.2 材料科学：作为有机发光二极管（OLED）材料中间体，参与共轭体系构建。
- 3.3 化学生物学：标记生物分子探针，通过硼酸酯与二醇的特异性结合实现糖类检测。

#### 4. 储存条件与使用建议

- 4.1 储存：密封保存于 -20℃ 惰性气体（如氩气）环境中，避免潮湿与光照，保质期 24 个月。
- 4.2 使用：建议在手套箱中称量，反应前需用无水 THF 或 DMSO 溶解。频哪醇硼酸酯基团遇水易水解，需严格控制反应体系水分含量 < 0.1%。

#### 5. 质量控制与安全信息

- 5.1 质量控制：批次提供 HPLC 谱图、<sup>1</sup>H NMR 及质谱鉴定报告，符合 USP 级标准。
- 5.2 安全防护：佩戴防尘口罩（NIOSH N95 级）及化学护目镜操作，皮肤接触后立

即用大量清水冲洗。

5.3 废弃物处理：按危险有机硼化合物处置，避免直接排入水体。

注：本产品仅供科研用途，不适用于临床或食品领域。具体应用需根据实验方案调整工艺参数。