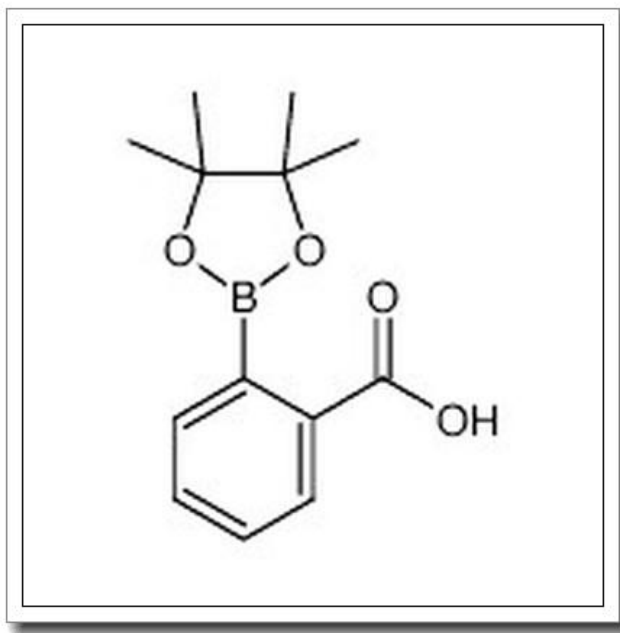


## 2-羧基苯硼酸频呢醇酯

*2-(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-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)benzoic acid
中文名称	2-羧基苯硼酸频呢醇酯
CAS 号	1187591-17-8
分子式	C <sub>13</sub> H <sub>17</sub> B <sub>04</sub>
分子量	248.083
纯度	>96%

## 产品说明

### 1. 产品概述与化学特性

2-羧基苯硼酸频呢醇酯 (CAS 号: 1187591-17-8) 是一种有机硼化合物, 化学式为  $C_{13}H_{17}B_2O_4$ , 分子量为 248.083。该化合物为白色至类白色结晶或粉末, 纯度通常高于 96%。其结构中的频呢醇酯基团 (4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼杂环戊烷) 与苯环上的羧基共同赋予其独特的反应活性, 使其在有机合成中表现出优异的稳定性和选择性。

### 2. 生物化学功能与重要性

作为硼酸酯类衍生物, 2-羧基苯硼酸频呢醇酯在 Suzuki-Miyaura 偶联反应中扮演关键角色, 是构建碳-碳键的重要中间体。其硼酸酯基团可与卤代芳烃或烯烃在钯催化剂作用下高效偶联, 而羧基则提供了进一步功能化修饰的位点。这一特性使其在药物化学、材料科学和生物标记物合成中具有广泛的应用价值。

### 3. 主要应用领域与具体用途

该化合物主要用于以下领域:

- 药物研发: 作为合成抗肿瘤、抗炎药物及蛋白酶抑制剂的中间体。
- 材料科学: 用于制备有机发光二极管 (OLED) 和共轭聚合物材料。
- 生物标记: 通过羧基与生物分子的偶联, 用于荧光探针或靶向载体的构建。
- 有机合成: 参与多步反应, 如酯化、酰胺化等, 扩展分子结构的多样性。

### 4. 储存条件与使用建议

建议将产品密封保存于 2-8°C 的干燥环境中, 避免与湿气、强氧化剂接触。使用时需在惰性气体 (如氮气或氩气) 保护下操作, 以防止硼酸酯水解。溶解推荐使用无水四氢呋喃 (THF) 或二甲基亚砜 (DMSO), 并确保反应体系严格无水。

### 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:

- 避免吸入或接触皮肤, 操作时需佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩。

- 如不慎接触眼睛或皮肤，立即用大量清水冲洗并就医。
- 废弃物需按危险化学品规范处置，不可直接排放至环境中。

以上信息仅供参考，具体实验方案需结合文献及实际条件优化。