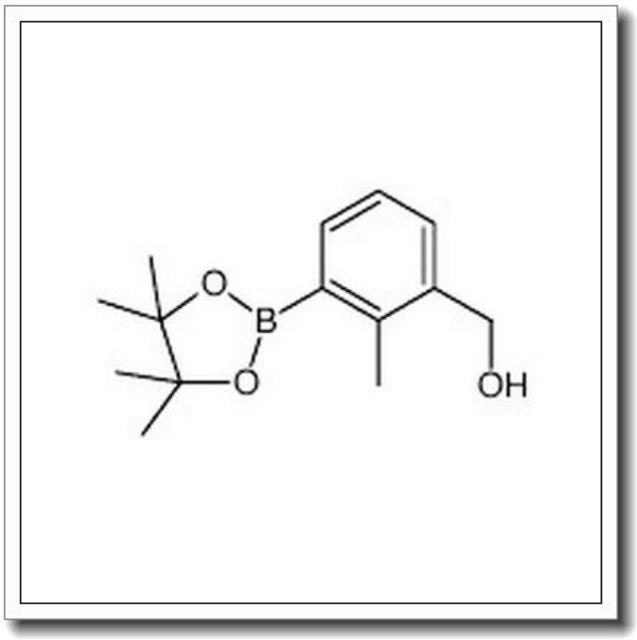
2-甲基-3-(羟甲基)苯硼酸频哪醇酯

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



产品基本信息

属性	值
化学名称	(2-methyl-3-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)phenyl)methanol
中文名称	2-甲基-3-(羟甲基)苯硼酸频哪醇酯
CAS 号	1400755-05-6
分子式	C14H21BO3
分子量	248.126
纯度	>96%

产品说明

2-甲基-3-(羟甲基)苯硼酸频哪醇酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为(2-methyl-3-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)phenyl)methanol，是一种含硼有机化合物，CAS 号为 1400755-05-6。其分子式为 C14H21BO3，分子量为 248.126，纯度标准>96%。该化合物为白色至类白色结晶性粉末，具有频哪醇硼酸酯的特征结构，苯环上的羟甲基赋予其极性修饰能力，在有机溶剂如甲醇、乙醇、二氯甲烷中具有良好溶解性。

2. 生物化学功能与重要性

作为硼酸酯类衍生物，该化合物在 Suzuki-Miyaura 偶联反应中表现出高反应活性，其频哪醇酯结构可有效保护硼酸基团，提高稳定性和储存性能。羟甲基的引入使其可作为多功能合成砌块，进一步衍生化为各类生物活性分子或材料前体。在药物化学领域，此类结构常用于激酶抑制剂和抗癌药物的中间体制备。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要应用于以下领域：

- 医药研发：作为关键中间体用于合成靶向治疗药物，特别是蛋白酪氨酸激酶抑制剂类化合物。
- 材料科学：参与构建有机光电材料（如 OLED 发光层材料）的硼掺杂结构单元。
- 化学合成：用于构建含硼手性配体或催化剂，在不对称催化反应中发挥作用。
- 生物标记：其硼酸基团可与生物分子中的二醇特异性结合，用于糖类化合物的标记与检测。

4. 储存条件与使用建议

建议在惰性气体（如氩气）保护下密封保存，储存温度-20° C 至 4° C，避免光照与潮湿环境。开封后建议一次性使用完毕，或分装后充氮保存。使用前需恢复至室温并充分干燥，反应体系中需严格除氧。与强氧化剂、强酸强碱类物质需隔离存放。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度>96%，核磁共振（1H NMR、13C NMR）和质谱（MS）验证结构。操作时需佩戴防护手套、护目镜，在通风橱中进行。若接触皮肤，立即用大量清水冲洗 15 分钟。根据 GHS 分类，该物质可能造成皮肤刺激（类别 2）和眼睛损伤（类别 1），安全数据表（SDS）可随货提供。废弃物处置需符合当地危险化学品处理法规。

注：本说明基于现有研究数据编制，具体应用需结合实验条件优化。产品规格可能因批次略有差异，建议使用前进行小试验证。