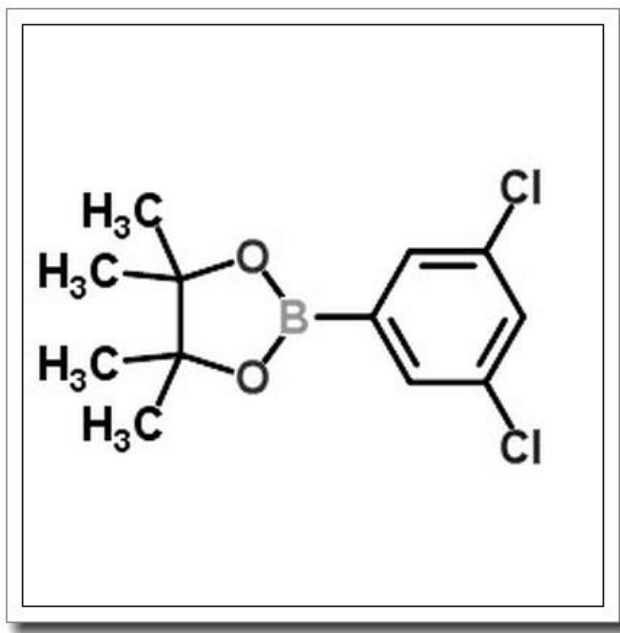


## 3,5-二氯苯硼酸频那醇酯

*2-(3,5-Dichlorophenyl)-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane*



### 产品基本信息

属性	值
化学名称	2-(3,5-Dichlorophenyl)-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane
中文名称	3,5-二氯苯硼酸频那醇酯
CAS 号	68716-51-8
分子式	C <sub>12</sub> H <sub>15</sub> BCl <sub>2</sub> O <sub>2</sub>
分子量	272.963
纯度	>96%

## 产品说明

### 2-(3,5-二氯苯基)-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼杂环戊烷产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

本品化学名称为 2-(3,5-Dichlorophenyl)-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane, 中文别名 3,5-二氯苯硼酸频那醇酯, CAS 号为 68716-51-8, 分子式  $C_{12}H_{15}BCl_2O_2$ , 分子量 272.963。外观为白色至类白色结晶粉末, 纯度  $\geq 96\%$ 。该化合物属于有机硼酸酯类衍生物, 其结构中含有的二氧硼杂环戊烷基团赋予其良好的稳定性, 而 3,5-二氯苯基则增强了反应活性, 使其成为重要的有机合成中间体。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为硼酸保护基团的前体, 该化合物在 Suzuki-Miyaura 偶联反应中表现出高效催化活性, 能够与芳基卤化物选择性结合形成碳-碳键。其频那醇酯结构可有效避免游离硼酸的自聚问题, 同时提高脂溶性, 便于在非极性溶剂中的反应应用。在药物化学领域, 该特性对于构建含氯芳环的复杂分子 (如抗真菌剂、激酶抑制剂) 具有关键作用。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

- 3.1 医药研发: 用于合成含 3,5-二氯苯基结构的候选药物分子, 尤其在抗感染和抗肿瘤化合物库构建中广泛应用。
- 3.2 材料科学: 作为有机光电材料的合成砌块, 参与制备 OLED 发光层或电子传输材料。
- 3.3 农药中间体: 衍生化后可生产高效氯代芳基类杀虫剂和除草剂。
- 3.4 科研用途: 在过渡金属催化反应机理研究中作为标准参照物。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于惰性气体 (如氩气) 保护的干燥环境中, 长期储存温度需控制在  $2-8^{\circ}C$ 。开封后需避免吸湿, 建议在手套箱或干燥器内操作。溶解时优先选用无水四氢呋喃或二甲基亚砜等脱水溶剂, 反应体系应严格除氧以防止硼酸酯水解。

## 5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 归一化法测定纯度，批次间偏差小于 1%。核磁共振氢谱（<sup>1</sup>H NMR）和质谱（MS）用于结构确证。安全数据表明，该化合物对眼睛和呼吸道有刺激性，操作时应佩戴护目镜和防尘口罩。若不慎接触皮肤，需立即用大量清水冲洗。废弃物处理需符合危险有机化学品处置规范，禁止直接排放至下水道。

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。更多技术参数可索取 COA（分析证书）。