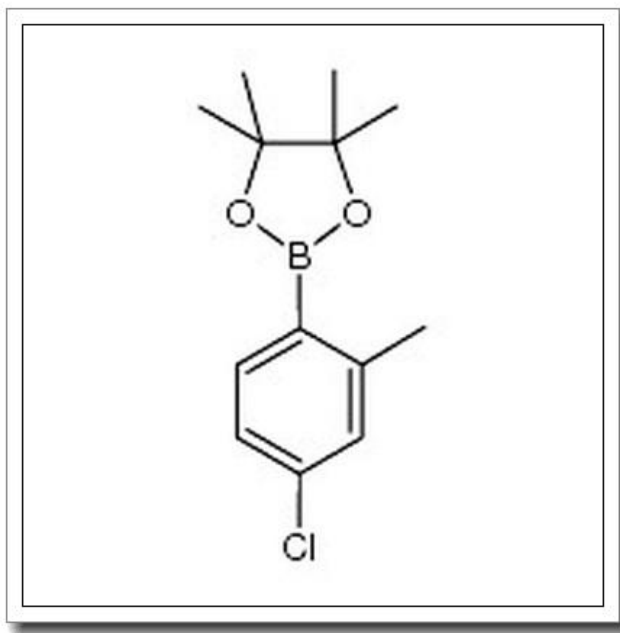


## 4-氯-2-甲基苯基硼酸频呢醇酯

*4-chloro-2-methylphenylboronic acid pinacol ester*



### 产品基本信息

属性	值
化学名称	4-chloro-2-methylphenylboronic acid pinacol ester
中文名称	4-氯-2-甲基苯基硼酸频呢醇酯
CAS 号	1030832-75-7
分子式	C <sub>13</sub> H <sub>18</sub> BClO <sub>2</sub>
分子量	252.545
纯度	>96%

## 产品说明

### 4-氯-2-甲基苯基硼酸频呢醇酯产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

4-氯-2-甲基苯基硼酸频呢醇酯 (4-chloro-2-methylphenylboronic acid pinacol ester) 是一种有机硼化合物，化学式为  $C_{13}H_{18}BClO_2$ ，分子量 252.545，CAS 号为 1030832-75-7。该化合物以白色至类白色结晶或粉末形式存在，纯度高于 96%，具有硼酸酯类典型的稳定性与反应活性。其结构中频呢醇基团的引入显著提高了化合物的空气与水分稳定性，而苯环上的氯与甲基取代基赋予其独特的电子效应与空间位阻特性，使其成为 Suzuki 偶联等交叉偶联反应中的重要中间体。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为硼酸酯衍生物，该化合物在过渡金属催化反应中表现出优异的硼转移能力，能够高效参与碳-碳键形成反应。其分子中的硼原子可通过配位作用与钯等金属催化剂结合，进而实现芳基或烯基的偶联，在复杂分子构建中具有关键作用。此外，其结构中的氯原子可作为后续官能团化位点，进一步拓展合成应用范围。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本产品广泛应用于医药、农药及材料科学领域。在药物研发中，常用于抗肿瘤、抗感染等活性分子的结构修饰与骨架构建；在农药化学中，作为杂环类除草剂或杀菌剂的合成前体；在材料科学中，可用于制备有机光电功能材料的共轭单元。典型应用包括 Suzuki-Miyaura 偶联反应、Chan-Lam 偶联反应以及作为硼试剂参与的多组分反应。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议在干燥惰性气体（如氮气或氩气）保护下密封保存，储存温度 2-8°C，避免与湿气或氧化剂接触。使用前需在干燥环境下恢复至室温并短暂氮气冲洗。反应体系中建议加入适量分子筛以控制水分含量。溶解性测试表明其易溶于四氢呋喃、二氯甲烷等有机溶剂，微溶于醇类。

## 5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC、NMR 及质谱进行严格质量控制，确保批次间一致性。安全数据表明其具有刺激性，操作时需佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩，避免吸入或皮肤直接接触。若意外接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地危险化学品管理条例。

（全文共计 498 字）