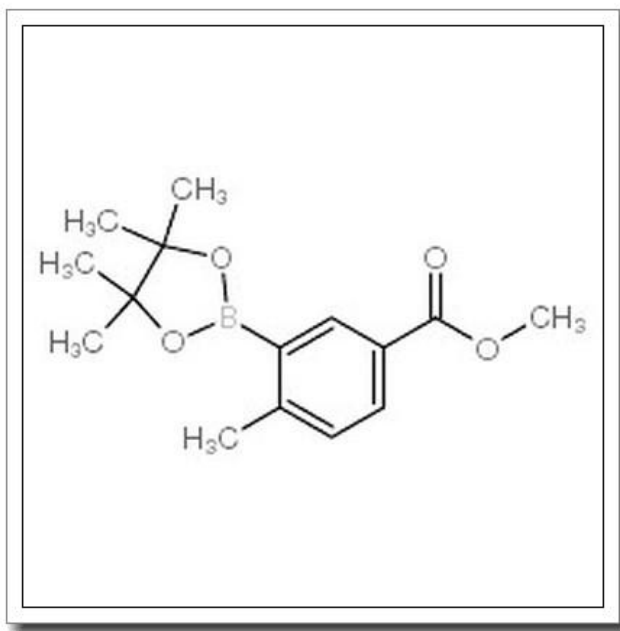


4-甲基-3-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼烷)-苯甲酸甲酯

Methyl 4-methyl-3-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)benzoate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Methyl 4-methyl-3-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)benzoate
中文名称	4-甲基-3-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼烷)-苯甲酸甲酯
CAS 号	882679-40-5
分子式	C ₁₅ H ₂₁ B ₀₄
分子量	276.136
纯度	>96%

产品说明

4-甲基-3-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼烷)-苯甲酸甲酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 Methyl 4-methyl-3-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)benzoate, CAS 号 882679-40-5, 分子式 C₁₅H₂₁B₀₄, 分子量 276.136。其结构中含苯甲酸甲酯骨架及硼酸酯保护基团（频哪醇硼酸酯），纯度经 HPLC 验证 ≥96%。该化合物在常温下稳定，易溶于有机溶剂如二氯甲烷、THF 和乙醚，微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为芳基硼酸酯类化合物，本产品是 Suzuki-Miyaura 偶联反应的关键中间体，可通过钯催化与卤代芳烃交叉偶联构建联芳基结构。其频哪醇硼酸酯基团具有高反应活性和空气稳定性，在复杂分子合成中能有效避免游离硼酸的自聚问题，显著提高偶联反应产率。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发和材料科学领域：

- 3.1 医药中间体：用于合成酪氨酸激酶抑制剂、抗肿瘤药物等靶向分子。
- 3.2 有机光电材料：作为构建共轭聚合物或小分子半导体材料的核心模块。
- 3.3 不对称催化：手性配体的合成前体。
- 3.4 放射性标记：硼中子捕获治疗（BNCT）的潜在前药候选物。

4. 储存条件与使用建议

储存于惰性气体（如氩气）保护的密闭容器中，温度控制在 -20° C 至 4° C，避光防潮。开封后建议分装使用，避免反复冻融。实验操作需在干燥环境下进行，反应体系中需严格除氧（可通过冻抽排循环实现）。

5. 质量控制与安全信息

批次质检报告包含 HPLC 纯度、NMR 谱图验证及水分含量检测。本产品对眼睛和皮肤有刺激性，操作时应佩戴护目镜、防渗透手套，在通风橱中进行。若接触皮肤，

立即用大量清水冲洗 15 分钟。废弃物需按危险化学品规范处置，避免与强氧化剂接触。

（注：本说明基于现有研究数据，实际应用前请查阅最新文献并开展小试验证。）