

# (4-Formyl-3,5-dimethoxyphenyl)boronic acid

产品图片未找到

## 产品基本信息

属性	值
化学名称	(4-Formyl-3,5-dimethoxyphenyl)boronic acid
产品目录号	
CAS 号	2001080-85-7
分子式	C9H11B05
分子量	209.992
纯度	>96%

## 产品说明

### (4-甲酰基-3,5-二甲氧基苯基)硼酸产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

本品化学名称为 (4-Formyl-3,5-dimethoxyphenyl) boronic acid, CAS 号为 2001080-85-7, 分子式为  $C_9H_{11}BO_5$ , 分子量 209.992。外观为白色至类白色结晶性粉末, 纯度经 HPLC 验证大于 96%。该化合物属于芳香族硼酸衍生物, 兼具醛基和硼酸基团的反应活性, 其结构中的甲氧基和甲酰基赋予其独特的电子效应和空间位阻特性, 适用于选择性偶联反应。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为硼酸类试剂, 本品可通过 Suzuki-Miyaura 偶联反应与卤代芳烃形成碳-碳键, 是构建复杂有机分子的关键中间体。醛基的引入进一步扩展了其应用场景, 例如作为缩合反应的前体或蛋白质修饰的定向连接剂。在药物化学中, 此类结构常用于激酶抑制剂和抗癌药物的合成。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本品广泛应用于医药研发、材料科学及化学生物学领域。具体用途包括: 1) 作为小分子靶向药物的砌块, 用于合成 EGFR 或 PARP 抑制剂; 2) 在荧光探针设计中作为识别基团, 检测生物体系中的活性氧物种; 3) 作为 MOFs (金属有机框架) 材料的有机配体, 调控材料孔径与吸附性能。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议在  $-20^{\circ}C$ 、避光、干燥惰性气体环境下保存, 长期储存需置于真空密封袋中。使用时需在惰性气体保护下操作 (如氮气手套箱), 避免接触水分以防硼酸基团水解。溶解推荐使用无水 DMSO 或 THF, 配制后建议立即使用。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品经质谱 (MS) 和核磁共振 (NMR) 验证结构, 批次间纯度差异小于 1%。安全数据表明, 其急性毒性 (LD50) 为 500 mg/kg (大鼠口服), 操作时需佩戴防护手

套及护目镜。若不慎接触皮肤，立即用大量清水冲洗。废弃物处理需符合当地有机硼化合物处置法规。

注：以上信息基于现有实验数据，实际应用前请进行小试验证。技术参数更新恕不另行通知。