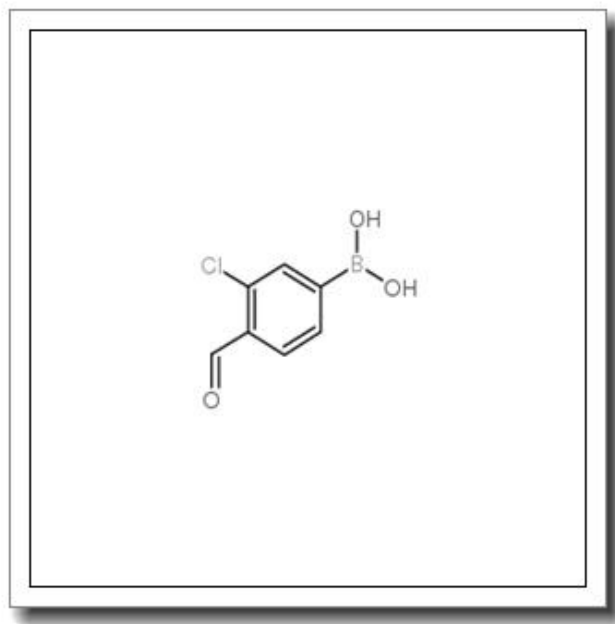


3-氯-4-甲酰苯硼酸

3-Chloro-4-Formylphenylboronic Acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-Chloro-4-Formylphenylboronic Acid
中文名称	3-氯-4-甲酰苯硼酸
CAS 号	1072952-53-4
分子式	C7H6BClO3
分子量	184.385
纯度	≥96%

产品说明

3-氯-4-甲酰苯硼酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3-氯-4-甲酰苯硼酸 (3-Chloro-4-Formylphenylboronic Acid) 是一种重要的有机硼化合物，化学式为 $C_7H_6BClO_3$ ，分子量 184.385。该化合物以白色至类白色结晶粉末形式存在，纯度通常 $\geq 96\%$ ，CAS 号为 1072952-53-4。其结构同时包含苯硼酸基团和甲酰基，使其兼具硼酸类化合物的配位能力与醛基的反应活性，在有机合成中表现出独特的化学特性。

2. 生物化学功能与重要性

作为硼酸衍生物，该化合物可通过硼原子与二醇或含羟基化合物形成可逆共价键，这一特性使其在糖类识别、酶抑制研究和药物载体设计中具有应用潜力。甲酰基的引入进一步扩展了其反应多样性，可参与缩合、还原胺化等反应，是构建复杂分子（如药物中间体或功能材料）的关键砌块。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药领域，本品常用于合成酪氨酸激酶抑制剂类抗癌药物的中间体。材料科学中，可作为制备共价有机框架 (COFs) 或荧光探针的前体。此外，在不对称催化反应中，其苯硼酸结构可作为手性配体的核心组分。具体实验用途包括 Suzuki-Miyaura 偶联反应、醛基衍生化反应以及生物分子标记等。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 $2-8^{\circ}C$ 干燥环境中，避免与强氧化剂、潮湿空气接触。开封后需充入惰性气体保护以延长稳定性。使用前需确认结晶状态，若结块或变色需重新纯化。实验操作应在通风橱中进行，佩戴防护手套及护目镜。溶解时可选用二甲基亚砜 (DMSO) 或四氢呋喃 (THF) 等有机溶剂。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度，批号关联的 COA (分析证书) 可提供详细质检数据。安全数据表明，该化合物对眼睛和皮肤有刺激性，LD50 (大鼠口服) 为 1200

mg/kg。意外接触时需立即用大量清水冲洗，并按 GHS 分类标识（H302-H318）处置废弃物。运输时归类为普通化学品，需避免与食品混装。

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。更多技术参数可联系技术支持部门获取。