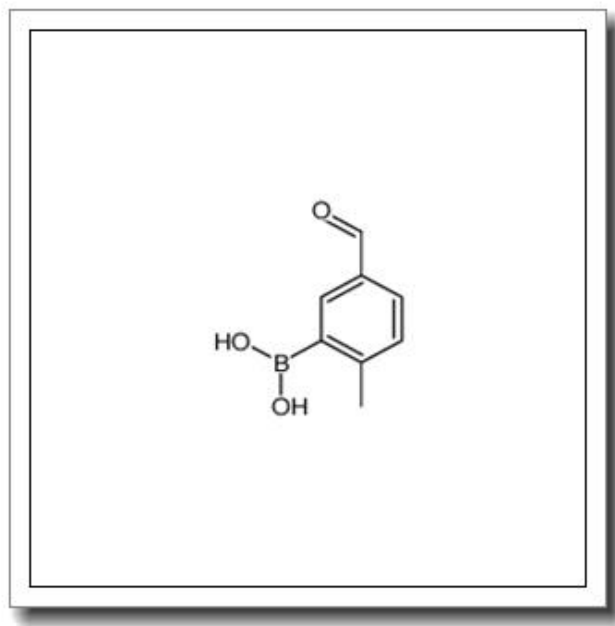


# (5-甲酰基-2-甲基苯基)硼酸

*(5-Formyl-2-methylphenyl)boronic acid*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	(5-Formyl-2-methylphenyl)boronic acid
中文名称	(5-甲酰基-2-甲基苯基)硼酸
CAS 号	1186398-35-5
分子式	C <sub>8</sub> H <sub>9</sub> B <sub>0</sub> O <sub>3</sub>
分子量	163.966
纯度	≥96%

## 产品说明

### (5-甲酰基-2-甲基苯基)硼酸产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

(5-Formyl-2-methylphenyl)boronic acid (CAS 号: 1186398-35-5) 是一种含硼芳香族化合物, 分子式为  $C_8H_9BO_3$ , 分子量为 163.966。该化合物由苯环骨架、甲酰基 (-CHO)、甲基 (-CH<sub>3</sub>) 及硼酸基团 (-B(OH)<sub>2</sub>) 构成, 兼具亲电性与亲核性, 其纯度  $\geq 96\%$ , 外观通常为白色至类白色结晶或粉末。硼酸基团赋予其与二醇类化合物的特异性结合能力, 而甲酰基则提供了进一步衍生化的反应位点, 使其在有机合成中具有高度灵活性。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为硼酸类衍生物, 该化合物可通过可逆共价键与生物分子中的顺式二醇结构 (如糖类、核苷酸) 结合, 这一特性使其在糖蛋白识别、酶抑制研究和药物载体设计中具有重要价值。其甲酰基可参与缩合、还原胺化等反应, 常用于构建杂环化合物或功能化高分子材料, 在化学生物学与药物化学领域被视为关键中间体。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发中, 本品常用于合成酪氨酸激酶抑制剂、抗生素及抗癌药物的硼酸类似物。材料科学领域, 其作为交联剂参与制备自修复水凝胶或响应性聚合物。分析化学中, 可用于修饰色谱固定相以提升糖类分离效率。此外, 在荧光探针设计中, 其结构可作为识别单元检测过氧化氢等活性氧物种。

#### 4. 储存条件与使用建议

需密封保存于干燥惰性气体 (如氮气) 环境中, 推荐储存温度为 2-8°C, 避免吸湿及光照。使用时应在通风橱中操作, 溶解建议选用无水 DMF 或 THF 等极性非质子溶剂。因硼酸基团易与水分形成三聚体, 反应体系需严格除水, 必要时加入分子筛脱水。长期储存建议定期检测纯度 (HPLC 或 NMR)。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品通过核磁共振 (<sup>1</sup>H/<sup>13</sup>C NMR)、质谱 (MS) 及高效液相色谱 (HPLC) 验证结

构一致性，残留溶剂符合 ICH 标准。安全数据表明，其急性毒性（LD50）为 300 mg/kg（大鼠口服），操作时需佩戴防护手套及护目镜，接触皮肤后立即用大量清水冲洗。废弃物处理应遵守当地危险化学品法规，避免与强氧化剂混放。

（全文共计 498 字）