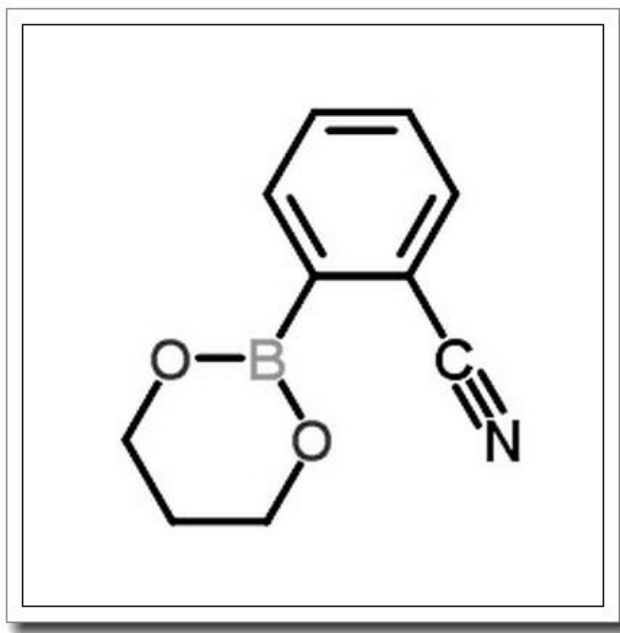


## 2-氰基苯硼酸 1,3-丙二醇酯

*2-(1,3,2-Dioxaborinan-2-yl)benzonitrile*



### 产品基本信息

属性	值
化学名称	2-(1,3,2-Dioxaborinan-2-yl)benzonitrile
中文名称	2-氰基苯硼酸 1,3-丙二醇酯
CAS 号	172732-52-4
分子式	C <sub>10</sub> H <sub>10</sub> BN <sub>2</sub> O <sub>2</sub>
分子量	187.003
纯度	>96%

## 产品说明

### 产品说明

#### 1. 产品概述与化学特性

2-氰基苯硼酸 1,3-丙二醇酯（化学名称：2-(1,3,2-Dioxaborinan-2-yl)benzotrile）是一种有机硼化合物，CAS 号为 172732-52-4，分子式为 C<sub>10</sub>H<sub>10</sub>BN<sub>2</sub>O<sub>2</sub>，分子量为 187.003。该化合物以白色至类白色固体形式存在，纯度通常高于 96%。其结构中的硼酸酯基团和氰基官能团使其在有机合成中表现出独特的反应活性，尤其在 Suzuki-Miyaura 偶联反应中具有重要应用价值。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为一种硼酸酯衍生物，该化合物在过渡金属催化的交叉偶联反应中作为关键中间体，能够高效构建碳-碳键。其氰基官能团进一步扩展了其在药物化学和材料科学中的应用潜力，例如作为合成含氰基芳烃类化合物的前体。此外，其稳定的硼酸酯结构在温和条件下易于水解，释放出活性硼酸，从而在生物共轭和标记技术中发挥作用。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

该产品广泛应用于医药研发、有机合成及材料科学领域。具体用途包括：

- 作为 Suzuki-Miyaura 偶联反应的底物，用于合成联芳基化合物。
- 在药物分子设计中作为关键砌块，用于构建含氰基或硼酸基团的活性分子。
- 在功能材料合成中，用于制备液晶材料或有机光电材料的前体。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议将本品置于干燥、阴凉的环境中，避免光照和潮湿。储存温度应控制在 2-8° C，以延长其稳定性。使用时需在惰性气体（如氮气或氩气）保护下操作，防止其与空气中的水分或氧气反应。溶解时推荐使用无水有机溶剂（如二甲基亚砜或四氢呋喃）。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品通过高效液相色谱（HPLC）和核磁共振（NMR）严格检测，确保纯度>96%。

安全信息如下:

- 避免吸入、接触皮肤或眼睛, 操作时需佩戴防护手套和护目镜。
- 如不慎接触, 立即用大量清水冲洗并就医。
- 废弃物应按照当地法规处理, 避免环境污染。

本品仅供科研用途, 不适用于医药或食品领域。