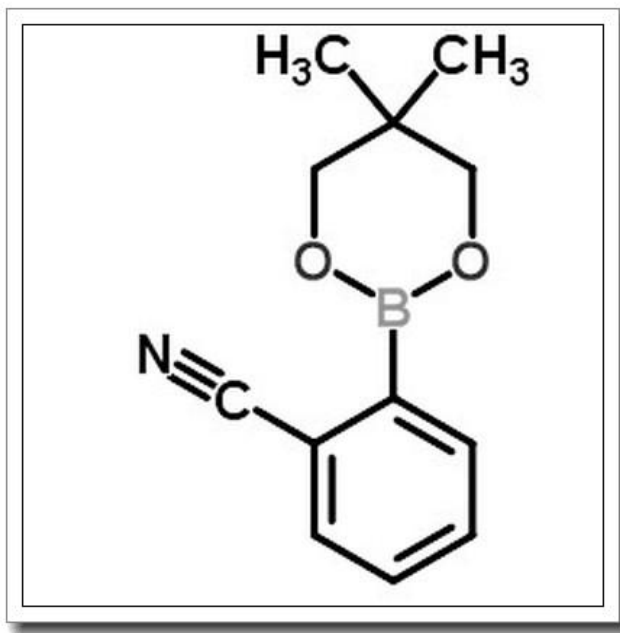


## 2-腈基苯硼酸新戊二醇酯

*2-Cyanophenylboronic acid, neopentyl ester*



### 产品基本信息

属性	值
化学名称	2-Cyanophenylboronic acid, neopentyl ester
中文名称	2-腈基苯硼酸新戊二醇酯
CAS 号	214360-47-1
分子式	C <sub>12</sub> H <sub>14</sub> BN <sub>2</sub> O <sub>2</sub>
分子量	215.056
纯度	>96%

## 产品说明

### 2-腈基苯硼酸新戊二醇酯产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

2-腈基苯硼酸新戊二醇酯 (2-Cyanophenylboronic acid, neopentyl ester) 是一种有机硼酸酯类化合物, CAS 号为 214360-47-1, 分子式为  $C_{12}H_{14}BN_2O_2$ , 分子量 215.056。该化合物以白色至类白色结晶粉末形式存在, 纯度 >96%, 具有硼酸酯基团 ( $-B(OR)_2$ ) 与氰基 ( $-CN$ ) 的双重官能团特性。其结构中的新戊二醇酯基团赋予分子良好的空间位阻效应, 显著提升了化合物的空气稳定性和水解稳定性。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为 Suzuki-Miyaura 偶联反应的关键中间体, 该化合物的硼酸酯基团可与卤代芳烃发生高效的钯催化交叉偶联反应。氰基的强吸电子特性使其特别适用于构建电子 deficient 型芳环体系, 在药物分子设计中常用于调节化合物的脂溶性和靶点结合能力。其独特的分子结构在蛋白酶抑制剂和激酶调节剂的合成中具有不可替代的作用。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于以下领域:

- 3.1 医药研发: 作为抗肿瘤药物 (如酪氨酸激酶抑制剂) 和抗糖尿病药物合成的关键砌块
- 3.2 材料科学: 用于制备有机电致发光材料 (OLED) 的电子传输层组分
- 3.3 农药化学: 合成新型杀虫剂和杀菌剂的中间体
- 3.4 分子探针: 通过硼酸酯与二醇的特异性结合, 用于糖类化合物的检测与标记

#### 4. 储存条件与使用建议

建议在惰性气体 (如氩气) 保护下密封保存, 储存温度应控制在  $-20^{\circ}C$  至  $4^{\circ}C$  范围内。开封后需在干燥环境中快速分装, 避免反复冻融。使用前需在氮气环境下恢复至室温, 溶解推荐使用无水 THF 或 DMSO 等脱水溶剂。实验操作应在通风良好的化学通风橱中进行。

## 5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度>96%，水分含量<0.5%，重金属残留<10ppm。安全数据表明该化合物属于刺激性化学品，接触皮肤可能引起红肿，操作时应佩戴防护手套和护目镜。如发生接触，立即用大量清水冲洗 15 分钟以上。废弃物处理需符合当地危险化学品处置法规，建议采用专业化学废弃物回收服务。

（注：本说明书基于现有研究数据编制，具体应用需根据实际实验条件优化。产品规格可能因批次略有差异，以随货质检报告为准。）