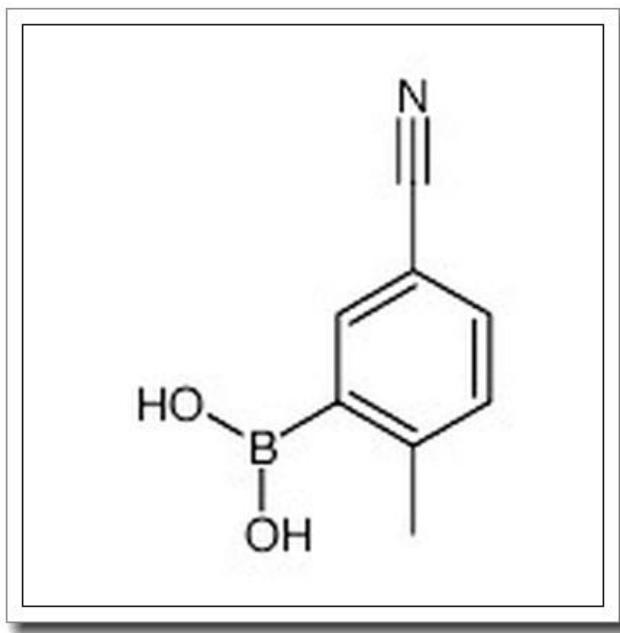


(5-氰基-2-甲基苯基)硼酸

(5-Cyano-2-methylphenyl)boronic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	(5-Cyano-2-methylphenyl)boronic acid
中文名称	(5-氰基-2-甲基苯基)硼酸
CAS 号	867333-43-5
分子式	C ₈ H ₈ BN ₂ O ₂
分子量	160.966
纯度	>96%

产品说明

5-氰基-2-甲基苯基硼酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

5-氰基-2-甲基苯基硼酸 ((5-Cyano-2-methylphenyl)boronic acid) 是一种有机硼化合物，化学式为 $C_8H_8BN_2O_2$ ，分子量为 160.966。该化合物为白色至类白色结晶粉末，CAS 号为 867333-43-5，纯度高于 96%。其结构中的硼酸基团 ($-B(OH)_2$) 和氰基 ($-CN$) 赋予其独特的反应活性，使其在有机合成和药物化学中具有重要价值。该化合物易溶于极性有机溶剂如甲醇、乙醇和 DMSO，但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

作为硼酸类衍生物，5-氰基-2-甲基苯基硼酸可通过硼酸酯化反应与二醇或羟基化合物形成稳定的环状酯，这一特性使其成为 Suzuki-Miyaura 交叉偶联反应的关键中间体。氰基的引入进一步增强了其电子亲和性，使其在构建含氮杂环化合物时表现出高效性。此外，该化合物在糖类识别、蛋白质标记和酶抑制剂开发等领域也具有潜在应用价值。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品广泛应用于医药研发、材料科学和有机合成领域。在药物化学中，它常用于合成靶向抗癌药物和抗炎药物的硼酸类似物。在材料科学中，可作为功能化单体参与聚合物合成，改善材料的荧光或导电性能。此外，它还用于制备液晶材料、传感器和分子探针，尤其在糖类传感器的开发中表现突出。

4. 储存条件与使用建议

建议将本品置于干燥、避光的环境中，储存温度控制在 $2-8^{\circ}C$ ，以延长稳定性。开封后需充入惰性气体（如氮气）密封保存，避免吸湿和氧化。使用时需在干燥惰性气氛（如氩气）下操作，避免与强氧化剂或酸碱物质直接接触。溶解时建议使用无水有机溶剂，并确保反应体系无水无氧。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和 NMR 严格检测，纯度 $\geq 96\%$ 。使用时需穿戴防护手套、护目镜和

实验服，避免吸入粉尘或接触皮肤。若不慎接触，应立即用大量清水冲洗，并寻求医疗帮助。其急性毒性数据尚未完全明确，建议在通风橱中操作。废弃物需按危险化学品处理规范处置，禁止直接排放至环境中。

(全文共计 498 字)