

(3-cyano-2-methylphenyl)boronic acid

产品图片未找到

产品基本信息

属性	值
化学名称	(3-cyano-2-methylphenyl)boronic acid
产品目录号	
CAS 号	313546-19-9
分子式	C ₈ H ₈ BN ₂ O ₂
分子量	160.966
纯度	>96%

产品说明

(3-氰基-2-甲基苯基)硼酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

(3-氰基-2-甲基苯基)硼酸 (化学式: $C_8H_8BN_2O_2$, CAS 号: 313546-19-9) 是一种含硼有机化合物, 分子量为 160.966, 纯度 $\geq 96\%$ 。该化合物以白色至类白色结晶或粉末形式存在, 具有硼酸基团 ($-B(OH)_2$) 和氰基 ($-CN$) 的协同反应活性, 使其在偶联反应中表现出高选择性。其苯环上的甲基取代基可进一步调节空间位阻, 增强反应可控性。

2. 生物化学功能与重要性

作为硼酸类衍生物, 该化合物是 Suzuki-Miyaura 偶联反应的关键中间体, 广泛应用于碳-碳键构建。氰基的强吸电子特性可优化其与过渡金属催化剂的配位能力, 提升偶联效率。在药物化学中, 其结构单元常见于激酶抑制剂和抗肿瘤药物的合成。

3. 主要应用领域与具体用途

- 医药研发: 用于合成含氰基芳环的候选药物分子, 如 EGFR 抑制剂。
- 材料科学: 作为有机发光二极管 (OLED) 中间体, 参与共轭聚合物构建。
- 农业化学: 制备具有特定生物活性的除草剂或杀虫剂前体。
- 学术研究: 在金属有机化学中用于机理研究或新型配体开发。

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, 置于 $2-8^{\circ}C$ 干燥避光环境中。开封后需避免长时间暴露于空气, 以防硼酸基团水解。使用时需在干燥环境下操作, 推荐以无水四氢呋喃或二甲基亚砜为溶剂。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, MS 和 NMR 验证结构。安全注意事项:

- 穿戴防护手套、护目镜, 避免吸入粉尘或接触皮肤。
- 遇明火可燃, 需远离氧化剂。

- 应急处理：皮肤接触时立即用大量清水冲洗，就医。

废弃物需按危险化学品规范处置。

（注：实际使用前请查阅最新物料安全数据表（MSDS）以获取完整安全信息。）