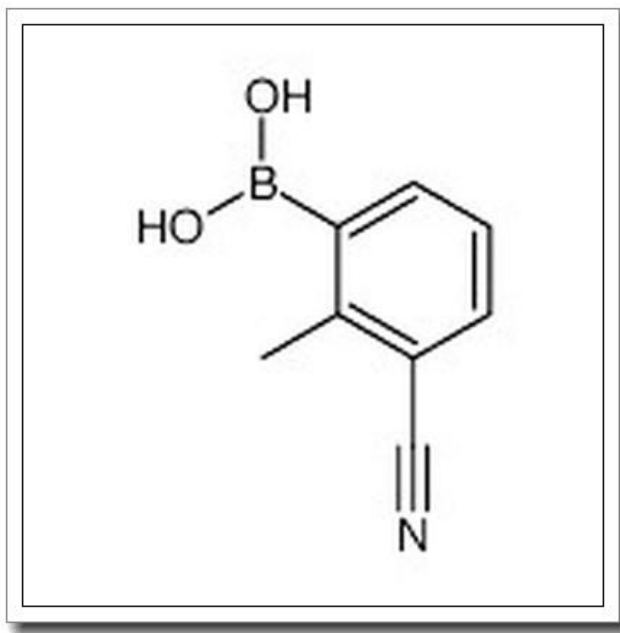


3-氰基-2-甲基苯硼酸

(3-cyano-2-methylphenyl)boronic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	(3-cyano-2-methylphenyl)boronic acid
中文名称	3-氰基-2-甲基苯硼酸
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-甲基苯硼酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3-氰基-2-甲基苯硼酸 ((3-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。其 CAS 号为 313546-19-9, 外观通常为白色至类白色结晶性粉末。该化合物含有硼酸基团 ($-B(OH)_2$) 和氰基 ($-CN$) 官能团, 具有较高的反应活性, 尤其在 Suzuki 偶联反应中表现出优异的性能。纯度标准为 $>96\%$, 确保其在合成应用中的可靠性。

2. 生物化学功能与重要性

作为苯硼酸衍生物, 该化合物在过渡金属催化的交叉偶联反应中扮演关键角色, 能够与卤代芳烃或烯炔高效结合, 形成碳-碳键。氰基的引入增强了其电子亲和性, 使其在药物中间体和材料科学领域具有独特价值。此外, 硼酸基团的可逆共价结合特性使其在糖类识别和传感器开发中也备受关注。

3. 主要应用领域与具体用途

3-氰基-2-甲基苯硼酸广泛应用于医药研发、有机合成及材料科学领域。在医药化学中, 它是合成激酶抑制剂和抗肿瘤药物的重要中间体。在材料领域, 可用于制备荧光标记分子或功能性高分子材料。此外, 其作为 Suzuki 偶联反应的底物, 在复杂分子构建 (如天然产物全合成) 中不可或缺。

4. 储存条件与使用建议

本品需密封保存于干燥、避光环境中, 推荐储存温度为 $2-8^{\circ}C$, 长期暴露于潮湿或高温环境可能导致水解或聚合。使用时应避免直接接触皮肤和眼睛, 操作需在通风橱中进行, 并佩戴防护手套和护目镜。溶解性测试表明, 其易溶于甲醇、乙醇等极性有机溶剂, 水溶性较低。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和 NMR 严格检测, 确保纯度 $>96\%$, 并提供完整的分析证书 (CoA)。安全数据表明, 其急性毒性较低, 但仍需遵循化学品通用防护措施。如

不慎吸入或接触，应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地环保法规，建议通过专业化学品回收机构处置。

注：本说明基于现有实验数据编写，具体应用需结合用户实际需求进一步验证。