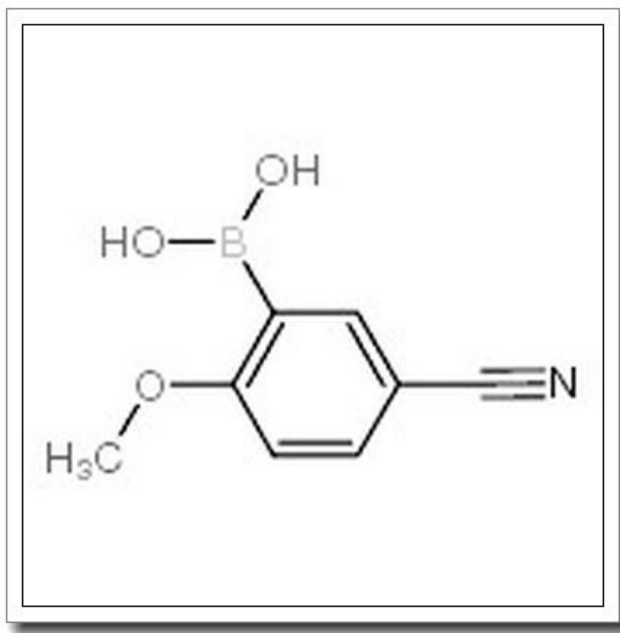


5-氰基-2-甲氧基苯硼酸

(5-cyano-2-methoxyphenyl)boronic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	(5-cyano-2-methoxyphenyl)boronic acid
中文名称	5-氰基-2-甲氧基苯硼酸
CAS 号	612833-37-1
分子式	C ₈ H ₈ BN ₃
分子量	176.965
纯度	>96%

产品说明

5-氰基-2-甲氧基苯硼酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

5-氰基-2-甲氧基苯硼酸（化学名称：(5-cyano-2-methoxyphenyl)boronic acid）是一种有机硼酸类化合物，CAS 号为 612833-37-1，分子式 $C_8H_8BN_03$ ，分子量 176.965。本品为白色至类白色结晶性粉末，纯度大于 96%，具有良好的化学稳定性和反应活性。其结构中的硼酸基团（ $-B(OH)_2$ ）和氰基（ $-CN$ ）赋予其独特的配位能力和偶联反应特性，是 Suzuki-Miyaura 交叉偶联反应中的重要中间体。

2. 生物化学功能与重要性

作为硼酸衍生物，该化合物在有机合成中表现出优异的偶联能力，尤其适用于构建碳-碳键的催化反应。氰基的强吸电子效应可调节苯环电子云密度，增强硼酸基团的反应活性，使其在药物化学和材料科学中具有重要价值。此外，其结构特性使其可作为蛋白酶抑制剂或受体配体的合成前体，在生物活性分子设计中广泛应用。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药中间体、液晶材料及高分子聚合物的合成。在药物研发中，常用于抗肿瘤、抗炎药物（如酪氨酸激酶抑制剂）的骨架构建；在材料领域，可作为有机发光二极管（OLED）或光电材料的修饰单元。此外，其硼酸基团能与二醇类化合物可逆结合，在糖类传感器开发中亦有潜在应用。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 2-8°C 干燥环境中，避免与强氧化剂、酸碱物质接触。使用时需在惰性气体（如氮气）保护下操作，防止吸湿降解。溶解性测试表明，本品易溶于二甲基亚砜（DMSO）、甲醇等极性溶剂，水溶性较低，建议预先配制储备液。反应体系中需注意控制 pH 值（中性至弱碱性条件最佳）。

5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，残留溶剂符合 ICH 标准。安全数据表明，其急性毒性（LD50）为 300 mg/kg（大鼠经口），操作时需佩戴防护手套、护目镜，并在通风

橱中进行。若接触皮肤或眼睛，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理应遵守当地化学品管理法规，避免环境污染。

（注：本说明基于现有实验数据编制，具体应用需结合用户工艺条件进一步验证。）