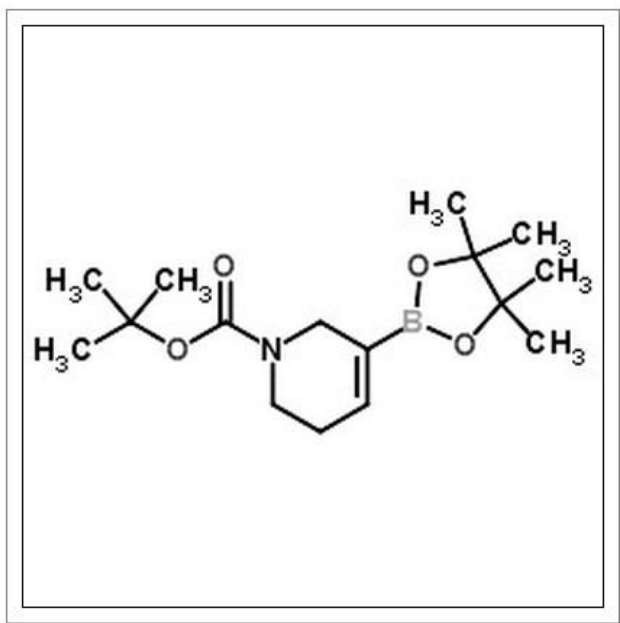


1-Boc-3,6-二氢-2H-吡啶-5-硼酸频哪醇酯

tert-Butyl 3-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-5,6-dihydropyridine-1(2H)-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	<i>tert-Butyl 3-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-5,6-dihydropyridine-1(2H)-carboxylate</i>
中文名称	1-Boc-3,6-二氢-2H-吡啶-5-硼酸频哪醇酯
CAS 号	885693-20-9
分子式	C ₁₆ H ₂₈ BN ₀₄
分子量	309.209
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为 1-Boc-3,6-二氢-2H-吡啶-5-硼酸频哪醇酯（化学名称：tert-Butyl 3-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-5,6-dihydropyridine-1(2H)-carboxylate），CAS 号为 885693-20-9，分子式为 C₁₆H₂₈BN₀₄，分子量 309.209。该化合物是一种含硼酸酯保护基的吡啶衍生物，纯度高于 96%，常温下为白色至类白色固体，具有有机硼酸酯的典型反应活性，可溶于常见有机溶剂如二氯甲烷、四氢呋喃等。

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，其硼酸酯基团能与卤代芳烃高效发生交叉偶联，构建碳-碳键。Boc 保护基的存在增强了化合物的稳定性，同时便于后续脱保护进行官能团转化。在药物化学中，该结构是合成含二氢吡啶骨架生物活性分子的重要砌块，广泛应用于激酶抑制剂、抗肿瘤药物及神经科学领域化合物的开发。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于医药研发和有机合成领域：

- 作为硼酸酯试剂参与多步合成，构建复杂杂环体系
- 用于制备靶向药物分子（如 EGFR 抑制剂、CDK 抑制剂等）
- 在材料科学中可作为有机光电材料的合成前体
- 实验室规模反应推荐用量为 1-5 当量，具体需根据反应体系优化

4. 储存条件与使用建议

储存于惰性气体（如氩气）保护的密闭容器中，温度控制在 -20° C 至 4° C，避免光照与湿气。开封后建议分装使用，剩余试剂需重新充入保护气体密封。使用前需在干燥环境下恢复至室温，称量操作需在手套箱或干燥环境中进行。溶解时优先选用无水级溶剂，并确保反应体系充分除氧。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC、NMR 及质谱进行批次纯度检测 (>96%)，残留溶剂符合 ICH 标准。本品对湿气敏感，遇水可能分解产生硼酸副产物。操作时需佩戴防护手套、护目镜，在通风橱中进行。若不慎接触皮肤，立即用大量清水冲洗。废弃物应作为有害化学品处置，避免直接排放。安全数据表 (SDS) 提供更详细的毒理学数据 (LD50、生态毒性等) 及应急处理方案。