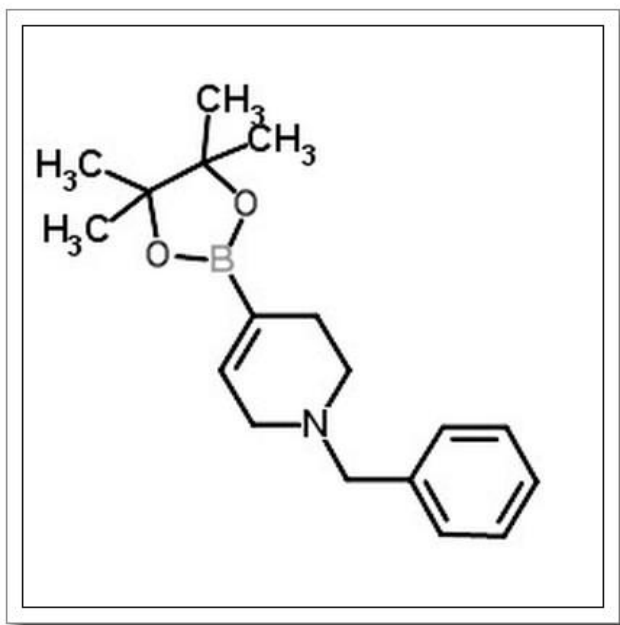


1-苄基-1,2,3,6-四氢吡啶-4-硼酸频哪醇酯

1-Benzyl-4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-1,2,3,6-tetrahydropyridine



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-Benzyl-4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-1,2,3,6-tetrahydropyridine
中文名称	1-苄基-1,2,3,6-四氢吡啶-4-硼酸频哪醇酯
CAS 号	1048976-83-5
分子式	C ₁₈ H ₂₆ BN ₂ O ₂
分子量	299.216
纯度	>96%

产品说明

1-苄基-1, 2, 3, 6-四氢吡啶-4-硼酸频哪醇酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 1-Benzyl-4-(4, 4, 5, 5-tetramethyl-1, 3, 2-dioxaborolan-2-yl)-1, 2, 3, 6-tetrahydropyridine, CAS 号为 1048976-83-5, 分子式为 C₁₈H₂₆BN₂O₂, 分子量为 299.216。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 纯度经 HPLC 检测确认大于 96%。其结构中的硼酸频哪醇酯基团赋予其良好的稳定性和反应活性, 适用于多种有机合成反应。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为重要的有机硼中间体, 在 Suzuki-Miyaura 偶联反应中表现出高效的反应活性。其四氢吡啶骨架与苄基的结合使其在药物化学领域具有特殊价值, 常用于构建含氮杂环结构。硼酸酯基团的引入显著提升了化合物的水溶性和反应选择性, 为复杂分子的模块化合成提供了关键砌块。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发中, 本品主要用于激酶抑制剂、神经递质调节剂等小分子药物的合成。其典型应用包括: 作为 PD-1/PD-L1 抑制剂的关键中间体; 用于构建阿尔茨海默症治疗药物的哌啶类结构单元; 在荧光探针合成中作为硼酸功能化试剂。实验室级产品适用于高通量筛选和先导化合物优化。

4. 储存条件与使用建议

建议在惰性气体保护下密封储存, 温度控制在 -20° C 至 4° C 范围内, 避免光照和潮湿环境。开封后建议一次性使用完毕, 或分装后充氩保存。使用前需在干燥环境下平衡至室温, 反应体系中需严格除氧。建议与钯催化剂配用时添加适量磷酸钾作为碱基。

5. 质量控制与安全信息

本产品经质谱、核磁共振和元素分析等多重验证, 批次间一致性控制在 ±1.5% 以内。含硼废弃物需按危险化学品规范处置。操作时应佩戴防尘口罩、护目镜及丁腈

手套，避免吸入粉尘或皮肤接触。如发生泄漏，应立即用惰性吸附材料处理。安全数据表（SDS）备索，请参阅第 14 节生态毒理信息进行环境风险评估。

注：本产品仅限科研用途，不适用于诊断或治疗用途。使用者应具备有机合成实验经验并遵守所在机构的生物安全规范。