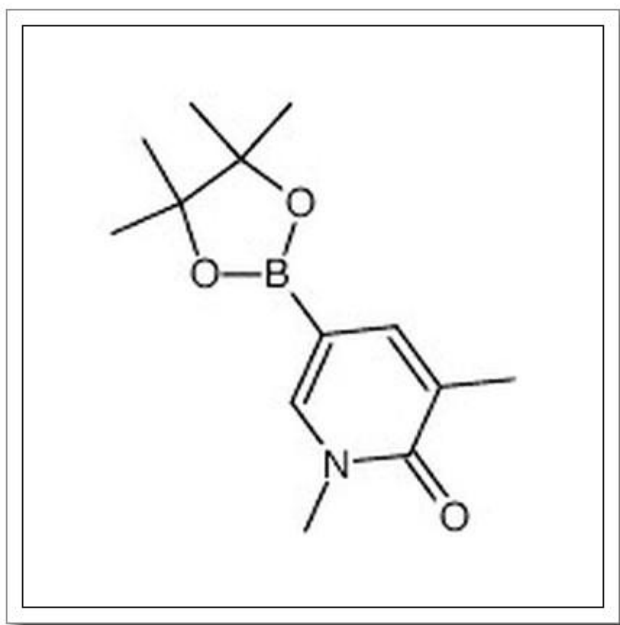


1,3-二甲基吡啶-2(1H)-酮-5-频哪醇硼酸酯

1,3-dimethyl-5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)pyridin-2(1H)-one



产品基本信息

属性	值
化学名称	1,3-dimethyl-5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)pyridin-2(1H)-one
中文名称	1,3-二甲基吡啶-2(1H)-酮-5-频哪醇硼酸酯
CAS 号	1425045-01-7
分子式	C ₁₃ H ₂₀ BN ₃ O
分子量	249.114
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

1,3-二甲基吡啶-2(1H)-酮-5-频哪醇硼酸酯 (CAS 号: 1425045-01-7) 是一种有机硼酸酯类化合物, 分子式为 $C_{13}H_{20}BN_3O_3$, 分子量为 249.114。该化合物以白色至类白色固体形式存在, 纯度通常高于 96%。其结构中包含频哪醇硼酸酯基团, 使其在有机合成中表现出优异的反应活性, 尤其是作为硼酸酯试剂参与 Suzuki-Miyaura 偶联反应。该化合物在常温下稳定, 但需避免与强氧化剂接触。

2. 生物化学功能与重要性

作为硼酸酯衍生物, 该化合物在药物化学和材料科学中具有重要价值。其硼酸酯基团可作为关键中间体, 用于构建复杂的杂环结构或功能化分子。在生物活性分子合成中, 它常用于引入吡啶酮骨架, 后者是许多药物分子 (如激酶抑制剂和抗菌剂) 的核心结构。此外, 其良好的稳定性和反应选择性使其成为高通量合成和组合化学的理想选择。

3. 主要应用领域与具体用途

该化合物广泛应用于医药研发、有机合成和材料科学领域。具体用途包括:

- 作为 Suzuki 偶联反应的硼酸酯供体, 用于构建 C-C 键。
- 合成含吡啶酮结构的药物中间体, 如抗肿瘤或抗炎药物。
- 在光电材料中作为功能单元, 用于开发新型有机半导体或荧光材料。

4. 储存条件与使用建议

建议将产品密封保存于 $-20^{\circ}C$ 至 $4^{\circ}C$ 的干燥环境中, 避免光照和潮湿。开封后需充入惰性气体 (如氮气) 以延长保存期限。使用时应在惰性气氛 (如氩气或氮气) 下操作, 避免接触水分或强酸强碱。溶解性测试表明, 该化合物易溶于二甲基亚砜 (DMSO) 和四氢呋喃 (THF), 但在水中溶解度较低。

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 $>96\%$ 。安全信息如下:

- 避免吸入粉尘或接触皮肤, 操作时需佩戴防护手套和护目镜。

- 如不慎接触眼睛或皮肤，立即用大量清水冲洗并就医。
- 废弃物应按照当地法规处理，不可随意排放。
- 安全数据表（SDS）可应要求提供，请在使用前详细阅读。