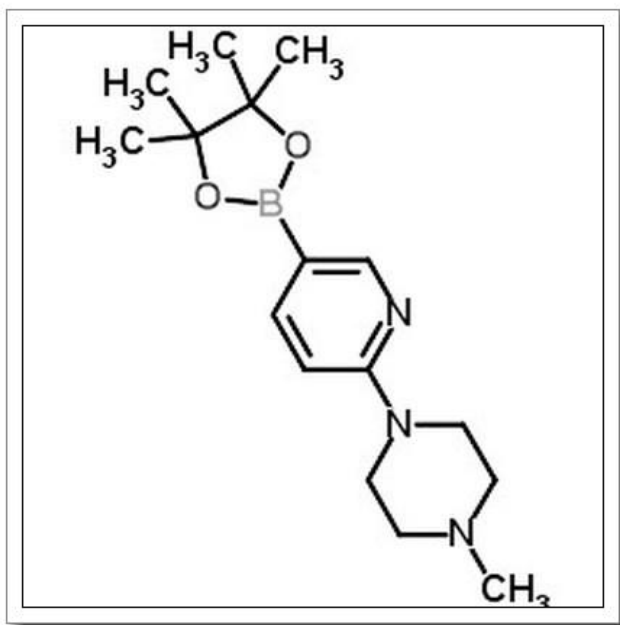


2-(4-甲基哌嗪-1-基)吡啶-5-硼酸频那醇酯

1-Methyl-4-(5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)pyridin-2-yl)piperazine



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-Methyl-4-(5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)pyridin-2-yl)piperazine
中文名称	2-(4-甲基哌嗪-1-基)吡啶-5-硼酸频那醇酯
CAS 号	918524-63-7
分子式	C ₁₆ H ₂₆ BN ₃ O ₂
分子量	303.207
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

2-(4-甲基哌嗪-1-基)吡啶-5-硼酸频那醇酯 (CAS 号: 918524-63-7) 是一种含硼有机化合物, 分子式为 $C_{16}H_{26}BN_3O_2$, 分子量为 303.207。该化合物为白色至类白色固体, 纯度高于 96%, 具有稳定的硼酸酯结构 (频那醇酯基团) 和哌嗪杂环体系。其化学结构中, 硼酸频那醇酯基团赋予其良好的反应活性, 尤其在 Suzuki-Miyaura 交叉偶联反应中可作为关键中间体。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物在有机合成和药物化学中具有重要价值。其硼酸酯基团能与卤代芳烃或烯烃发生高效的偶联反应, 广泛应用于碳-碳键的构建。哌嗪环的引入增强了分子的水溶性和生物相容性, 使其成为药物分子设计中的常见药效团。此外, 吡啶环的电子特性进一步提升了其在配体设计和催化反应中的应用潜力。

3. 主要应用领域与具体用途

- 药物研发: 作为中间体用于合成靶向激酶抑制剂、抗肿瘤药物及中枢神经系统药物。
- 材料科学: 参与构建有机光电材料 (如 OLEDs) 的共轭骨架。
- 化学合成: 用于 Suzuki 偶联反应, 高效制备联芳基或杂芳基化合物。
- 生物探针: 修饰后可作为荧光标记物或分子探针的组成部分。

4. 储存条件与使用建议

- 储存条件: 需避光、密封保存于 $-20^{\circ}C$ 或更低温度, 长期存放建议充惰性气体 (如氮气) 保护。
- 使用建议: 操作时需于干燥惰性氛围 (如氩气手套箱) 中进行, 避免接触水分或强氧化剂。溶解推荐使用无水 DMF 或 THF, 并现配现用。

5. 质量控制与安全信息

- 质量控制: 通过 HPLC 和 NMR 确保纯度 $>96\%$, 批次间提供 COA (质量分析证书)。

- 安全信息: 本品对眼睛和皮肤有刺激性, 操作时需佩戴防护手套及护目镜。若吸入或误食, 应立即就医。废弃物需按有害化学品规范处置。

(全文共 436 字)