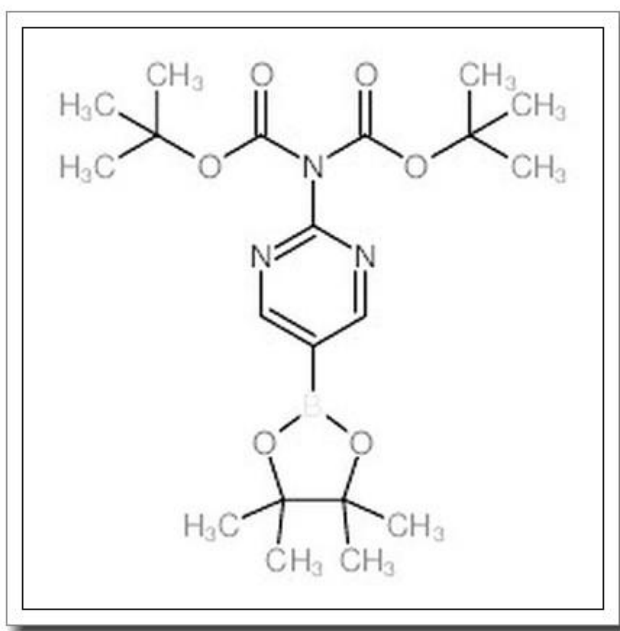


2-(N,N-双 BOC-氨基)嘧啶-5-硼酸频那醇酯

2-(N,N-BisBoc-amino)pyrimidine-5-boronic acid, pinacol ester



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-(N,N-BisBoc-amino)pyrimidine-5-boronic acid, pinacol ester
中文名称	2-(N,N-双 BOC-氨基)嘧啶-5-硼酸频那醇酯
CAS 号	1190423-36-9
分子式	C ₂₀ H ₃₂ BN ₃ O ₆
分子量	421.296
纯度	>96%

产品说明

2-(N,N-双 BOC-氨基)嘧啶-5-硼酸频那醇酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 2-(N,N-BisBoc-amino)pyrimidine-5-boronic acid, pinacol ester, 是一种高纯度有机硼酸酯衍生物, CAS 号为 1190423-36-9。其分子式为 C₂₀H₃₂BN₃O₆, 分子量 421.296, 外观通常为白色至类白色结晶粉末。结构中的 Boc (叔丁氧羰基) 保护基团和硼酸频那醇酯官能团赋予其优异的稳定性, 适用于偶联反应中的中间体合成。纯度经 HPLC 验证 ≥96%, 确保反应效率与重现性。

2. 生物化学功能与重要性

作为嘧啶类硼酸酯化合物, 该产品在 Suzuki-Miyaura 交叉偶联反应中表现出高反应活性, 能够与芳基卤化物高效构建碳-碳键。其双 Boc 保护特性可避免氨基在反应中的副反应, 同时频那醇酯结构增强了硼原子的亲电性, 显著提升偶联产率。在药物化学中, 此类结构是构建激酶抑制剂和核苷类似物的关键砌块。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品广泛应用于医药研发与有机合成领域, 具体包括:

- (1) 抗肿瘤药物中间体合成, 如 EGFR 抑制剂的前体修饰;
- (2) 荧光标记物与生物探针的制备, 利用嘧啶环的配位能力;
- (3) 材料科学中功能化聚合物的单体设计。典型实验场景需在惰性气体保护下进行钯催化偶联, 推荐用量为底物的 1.05-1.2 当量。

4. 储存条件与使用建议

储存于 -20° C、干燥避光环境中, 开封后需充入惰性气体密封保存。溶解性测试表明其在 THF、DMSO 中溶解度良好 (>50 mg/mL), 建议反应前通过氮气脱氧处理溶剂。操作时需佩戴防护手套及护目镜, 避免吸入粉尘或接触皮肤。

5. 质量控制与安全信息

批次质检报告包含 HPLC 纯度、水分含量 (≤0.5%) 及重金属残留 (≤10 ppm) 数据。该化合物对湿气敏感, 需在干燥环境下称量。安全数据表 (SDS) 标明其可能

导致眼睛刺激（GHS 分类 Eye Irrit. 2），泄漏处理需使用惰性吸附材料。废弃物应作为有害化学品处置，遵守当地法规。

注：本产品仅限科研用途，不适用于诊断或治疗。具体实验方案建议参考文献或咨询专业技术支持。