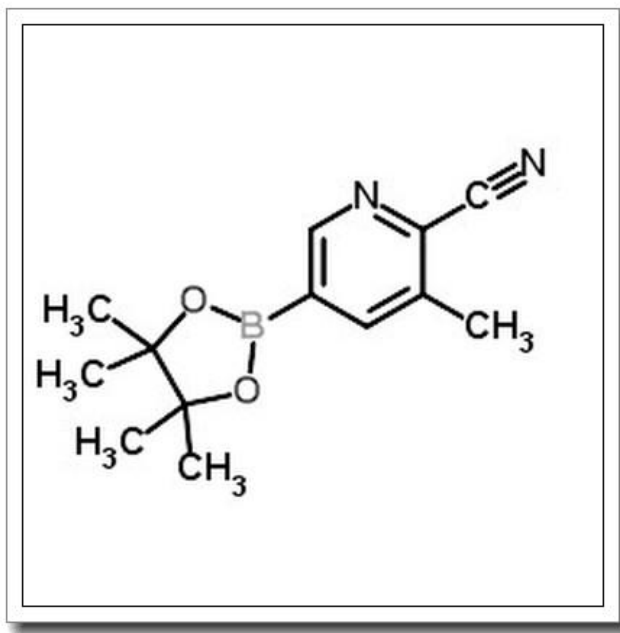


## 2-氰基-3-甲基吡啶-5-硼酸频那醇酯

*3-Methyl-5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)picolinonitrile*



### 产品基本信息

属性	值
化学名称	3-Methyl-5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)picolinonitrile
中文名称	2-氰基-3-甲基吡啶-5-硼酸频那醇酯
CAS号	1150561-70-8
分子式	C <sub>13</sub> H <sub>17</sub> BN <sub>2</sub> O <sub>2</sub>
分子量	244.097
纯度	>96%

## 产品说明

3-甲基-5-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼杂环戊烷-2-基)吡啶-2-甲腈产品说明书

### 1. 产品概述与化学特性

本品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 2-氰基-3-甲基吡啶-5-硼酸频那醇酯，是含硼杂环化合物的重要衍生物。其分子式为  $C_{13}H_{17}BN_2O_2$ ，分子量 244.097，CAS 号为 1150561-70-8。结构中的硼酸频那醇酯基团赋予其优异的稳定性和反应活性，而氰基与甲基的引入进一步增强了分子在偶联反应中的选择性。该化合物在常温下稳定，易溶于二甲基亚砜（DMSO）、四氢呋喃（THF）等有机溶剂，纯度经 HPLC 检测  $\geq 96\%$ 。

### 2. 生物化学功能与重要性

作为 Suzuki-Miyaura 交叉偶联反应的关键中间体，本品可通过硼酸酯基团与卤代芳烃高效构建碳-碳键。其吡啶环结构对药物分子设计具有特殊意义，能显著提升化合物的膜穿透性和靶标结合能力。在蛋白酶抑制剂和激酶调节剂的合成中，该结构单元已被广泛应用于抗肿瘤、抗炎等药物的先导化合物开发。

### 3. 主要应用领域与具体用途

本品主要应用于医药研发和材料科学领域。在医药化学中，常用于构建含吡啶硼酸酯结构的 ADC 药物（抗体偶联药物）连接子、EGFR 抑制剂及 PARP 抑制剂的核心片段。在材料领域，可作为有机电致发光材料（OLED）的前体，用于合成具有电子传输特性的共轭聚合物。典型反应条件需在无水无氧环境下，以钯催化剂催化进行芳基偶联。

### 4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于  $-20^{\circ}\text{C}$  惰性气体（如氩气）环境中，避免光照与湿气。开封后需在干燥箱内操作，剩余试剂应充氮后重新密封。使用前建议通过核磁共振（ $^1\text{H NMR}$ ）或薄层色谱（TLC）验证纯度。反应体系中需严格除氧，推荐以碳酸钾作为碱基，溶剂优先选择脱气的甲苯/乙醇混合体系（4:1）。

## 5. 质量控制与安全信息

本产品经 GC-MS、元素分析及 HPLC 三重验证，重金属残留 < 10 ppm。安全数据表明其急性口服毒性 (LD50) 为 1200 mg/kg (大鼠)，操作时需佩戴防尘口罩及化学护目镜。若接触皮肤，应立即用大量清水冲洗 15 分钟。废弃物处理需符合《国家危险废物名录》编号 HW06 标准，禁止直接排入下水道。

注：以上数据基于实验室环境测试，实际应用需根据具体工艺条件优化。