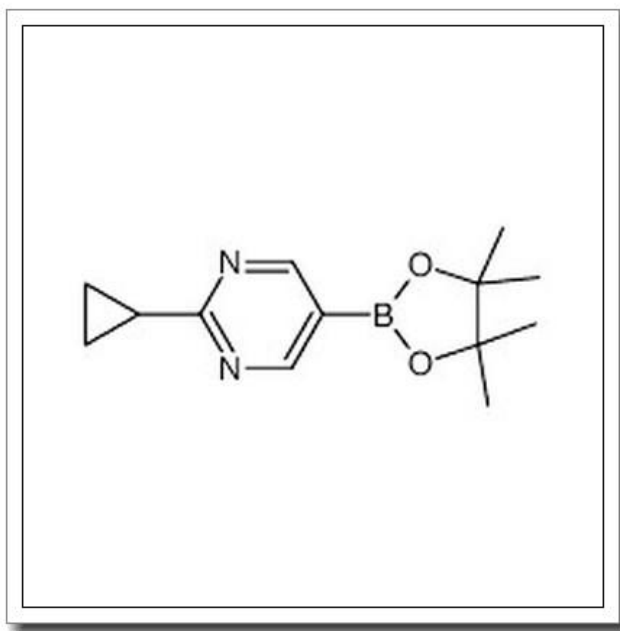


2-环丙基-5-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二噁硼烷-2-基)嘧啶

2-cyclopropyl-5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)pyrimidine



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-cyclopropyl-5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)pyrimidine
中文名称	2-环丙基-5-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二噁硼烷-2-基)嘧啶
CAS 号	1375301-91-9
分子式	C ₁₃ H ₁₉ BN ₂ O ₂
分子量	246.113
纯度	>96%

产品说明

2-环丙基-5-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二噁硼烷-2-基)嘧啶产品说明书

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-cyclopropyl-5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)pyrimidine，CAS 号 1375301-91-9，分子式 C₁₃H₁₉BN₂O₂，分子量 246.113。其结构中含嘧啶环与硼酸酯基团，具有显著的化学稳定性与反应活性。纯度经 HPLC 验证 ≥96%，易溶于常见有机溶剂如二甲基亚砜(DMSO)和四氢呋喃(THF)，但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为关键硼酸酯衍生物，在 Suzuki-Miyaura 偶联反应中表现出高效催化活性，能够与卤代芳烃形成碳-碳键。其嘧啶骨架赋予分子良好的生物相容性，而环丙基结构可增强空间位阻效应，显著提升反应选择性。在药物化学领域，此类结构常作为蛋白激酶抑制剂的中间体，对靶向药物开发具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发与有机合成领域：

- 3.1 医药中间体：用于构建抗肿瘤、抗病毒药物的嘧啶类活性分子片段。
- 3.2 材料科学：作为有机发光二极管(OLED)材料的合成前体。
- 3.3 化学生物学：用于开发硼中子捕获治疗(BNCT)的含硼靶向分子。
- 3.4 催化反应：在钯催化交叉偶联反应中作为硼酸酯供体。

4. 储存条件与使用建议

储存条件：需密封保存于-20℃惰性气体(如氩气)环境中，避免光照与湿气。开封后建议分装使用，剩余试剂需重新充氮保护。

使用建议：

- 4.1 反应体系需严格除氧，推荐在 Schlenk 线操作。
- 4.2 与卤代物偶联时，建议添加碳酸钾作为碱促进反应。
- 4.3 溶解时优先选用无水 DMSO，配制后溶液建议 24 小时内使用。

5. 质量控制与安全信息

质量控制：通过 ^1H NMR、 ^{13}C NMR 和 LC-MS 进行结构确证，HPLC 检测有机杂质含量 $< 3\%$ 。每批次提供 COA 分析证书。

安全信息：

- 5.1 危害分类：刺激性物质（类别 2），吞食有害（类别 3）。
- 5.2 防护措施：操作时需佩戴防尘口罩、化学护目镜及丁腈手套。
- 5.3 应急处理：皮肤接触后立即用大量清水冲洗 15 分钟，误食需就医洗胃。
- 5.4 废弃物处置：按危险化学品规范处理，不可直接排入下水道。

本产品仅限科研用途，不适用于临床或食品领域。使用前请查阅最新版 MSDS 获取完整安全数据。