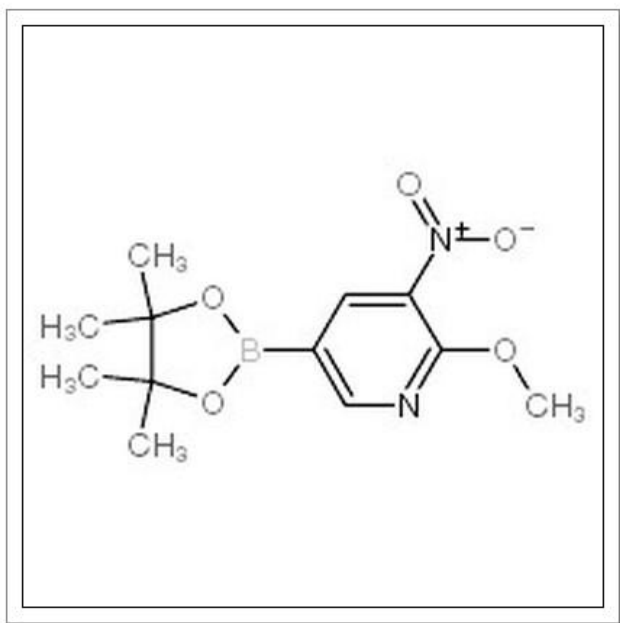


2-甲氧基-3-硝基-5-(4,4,5,5-四甲基-[1,3,2]二噁硼烷-2-基)-吡啶

2-methoxy-3-nitro-5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)pyridine



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-methoxy-3-nitro-5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)pyridine
中文名称	2-甲氧基-3-硝基-5-(4,4,5,5-四甲基-[1,3,2]二噁硼烷-2-基)-吡啶
CAS号	1083168-94-8
分子式	C ₁₂ H ₁₇ BN ₂ O ₅
分子量	280.085
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

2-甲氧基-3-硝基-5-(4,4,5,5-四甲基-[1,3,2]二噁硼烷-2-基)-吡啶 (CAS 号: 1083168-94-8) 是一种含硼杂环化合物, 分子式为 $C_{12}H_{17}BN_2O_5$, 分子量为 280.085。该化合物以吡啶环为核心结构, 通过 2-位甲氧基、3-位硝基以及 5-位的 4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二噁硼烷基团修饰, 具有显著的电子效应和空间位阻特性。其纯度高于 96%, 常温下为固体, 需避光保存以确保稳定性。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为硼酸酯类衍生物, 在有机合成中表现出优异的偶联反应活性, 尤其是作为 Suzuki-Miyaura 交叉偶联反应的关键中间体。其硼酸酯基团可与卤代芳烃高效结合, 构建碳-碳键, 广泛应用于药物分子和功能材料的合成。此外, 硝基和甲氧基的引入进一步增强了其反应多样性, 使其成为多步合成中的重要砌块。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发领域, 该化合物常用于构建含吡啶结构的活性分子, 如激酶抑制剂和抗肿瘤药物前体。在材料科学中, 可用于合成有机光电材料或配体修饰的金属配合物。此外, 其作为硼酸保护基的中间体, 在复杂天然产物全合成中具有重要价值。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 、干燥惰性气体 (如氩气) 保护下避光储存, 开封后需充氮密封以防潮解。使用时应避免与强氧化剂或酸接触, 操作需在通风橱中进行, 佩戴防护手套和护目镜。溶解性测试表明, 其易溶于二甲基亚砷 (DMSO) 和四氢呋喃 (THF), 微溶于甲醇。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $>96\%$, 核磁共振 (NMR) 和质谱 (MS) 验证结构。安全数据表明, 其具有刺激性, 可能引起皮肤或眼部不适。若不慎接触, 需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应按照危险化学品规范处置。建议在专业人员指导下使用, 并参考材料安全数据表 (MSDS) 获取详细风险信息。