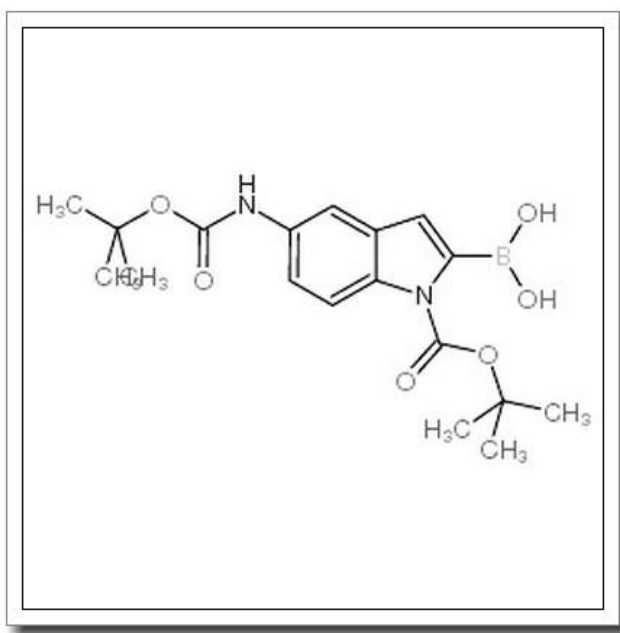


2-硼-5-[[(1,1-二甲基乙氧基) 羰基] 氨基]-1H-吲哚-1-羧酸-1-(1,1-二甲基乙基) 酯

[1-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonyl]-5-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonylamino]indol-2-yl]boronic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	[1-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonyl]-5-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonylamino]indol-2-yl]boronic acid
中文名称	2-硼-5-[[(1,1-二甲基乙氧基) 羰基] 氨基]-1H-吲哚-1-羧酸-1-(1,1-二甲基乙基) 酯
CAS 号	913388-66-6
分子式	C ₁₈ H ₂₅ BN ₂ O ₆

分子量	376.212
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

[1-[(2-甲基丙烷-2-基)氧羰基]-5-[(2-甲基丙烷-2-基)氧羰基氨基]吡啶-2-基]硼酸 (CAS 号: 913388-66-6) 是一种含硼吡啶衍生物, 分子式为 $C_{18}H_{25}BN_2O_6$, 分子量 376.212。该化合物以白色至类白色固体形式存在, 纯度 >96%, 结构中含有两个叔丁氧羰基 (Boc) 保护基团及一个硼酸官能团, 具有良好的化学稳定性和反应活性, 适用于有机合成中的偶联反应和官能团转化。

2. 生物化学功能与重要性

作为硼酸类化合物, 该产品在 Suzuki-Miyaura 偶联反应中可作为关键中间体, 与卤代芳烃或烯烃高效构建碳-碳键。其吡啶骨架和 Boc 保护基团的设计使其在药物化学中尤为重要, 常用于靶向蛋白激酶抑制剂或 G 蛋白偶联受体调节剂的合成。硼酸基团的引入进一步扩展了其在生物共轭和探针标记中的应用潜力。

3. 主要应用领域与具体用途

- 药物研发: 用于合成抗肿瘤、抗炎或中枢神经系统药物的硼酸类前体化合物。
- 材料科学: 作为有机光电材料的构建模块, 如 OLED 或荧光探针的中间体。
- 化学生物学: 通过硼酸与二醇的特异性结合, 用于糖类或核酸的标记与检测。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 下避光干燥储存, 长期保存需充惰性气体保护。使用时需在惰性气氛 (如氮气或氩气) 中操作, 避免接触水分或强氧化剂。溶解性测试表明, 该产品易溶于二甲基亚砜 (DMSO)、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 验证纯度 >96%, MS 和 NMR 确证结构。安全操作需佩戴防护手套和护目镜, 避免吸入或皮肤接触。如意外接触, 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。

(注: 实际使用前请查阅最新材料安全数据表 (MSDS) 并遵循实验室安全规程。)