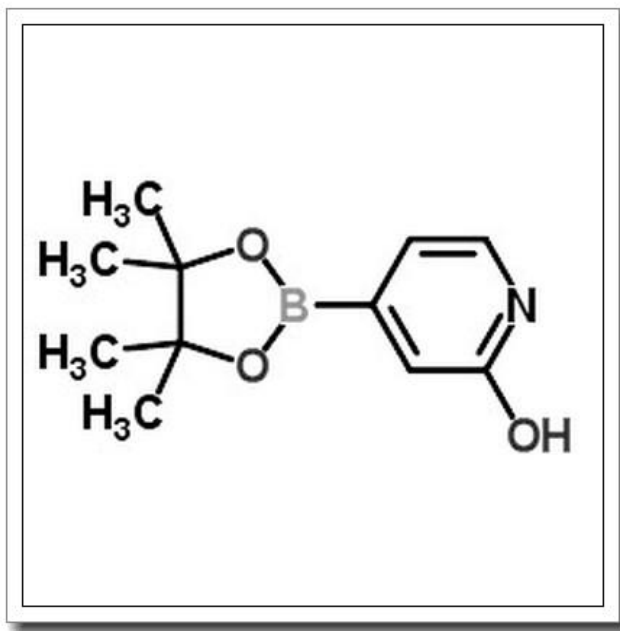


2-羟基吡啶-4-硼酸频那醇酯

4-(4,4,5,5-Tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)pyridin-2(1H)-one



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-(4,4,5,5-Tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)pyridin-2(1H)-one
中文名称	2-羟基吡啶-4-硼酸频那醇酯
CAS 号	1256358-90-3
分子式	C ₁₁ H ₁₆ BN ₃ O ₃
分子量	221.061
纯度	>96%

产品说明

2-羟基吡啶-4-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 4-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼杂环戊烷-2-基)吡啶-2(1H)-酮，是一种含硼杂环化合物。其分子式为 C₁₁H₁₆BN₃O₃，分子量 221.061，CAS 号为 1256358-90-3。该化合物以白色至类白色结晶粉末形式存在，纯度经 HPLC 验证大于 96%。结构中硼酸频那醇酯基团与吡啶酮环的协同作用，使其在有机合成中表现出优异的稳定性和反应活性。

2. 生物化学功能与重要性

作为 Suzuki-Miyaura 偶联反应的关键中间体，该硼酸酯可通过钯催化与卤代芳烃高效偶联，构建 C-C 键。其吡啶酮骨架赋予分子两性特性，既能参与氢键形成，又可作为配体与金属离子结合。在药物化学中，此类结构常用于激酶抑制剂和抗菌剂的合成，例如作为 EGFR 抑制剂的核心片段。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要应用于医药研发和材料科学领域。在医药方向，用于构建抗肿瘤药物（如 BTK 抑制剂）的吡啶酮类衍生物；在材料领域，可作为有机发光二极管（OLED）材料的合成前体。实验室级用途包括：

- 过渡金属催化交叉偶联反应的底物
- 杂环化合物库构建的模块化砌块
- 蛋白质-配体相互作用研究的探针分子

4. 储存条件与使用建议

建议在惰性气体（如氩气）保护下密封保存，储存温度 -20° C 至 4° C，避免光照和湿度。开封后需在干燥箱中操作，建议使用前通过氮气吹扫去除溶解氧。溶解性测试显示，该化合物易溶于 THF、DMSO 等极性有机溶剂，水溶液中需加入适量助溶剂（如 10%乙醇）。

5. 质量控制与安全信息

本产品经质谱 (MS) 和核磁共振 (NMR) 双重验证, 批次间偏差小于 2%。安全数据表明其急性口服毒性 (LD50) >500 mg/kg (大鼠), 但仍需佩戴防护手套和护目镜操作。废弃物处理应遵守有机硼化合物处置规范, 避免与强氧化剂接触。如遇意外接触眼睛, 立即用大量清水冲洗并就医。

(全文共计 498 字)