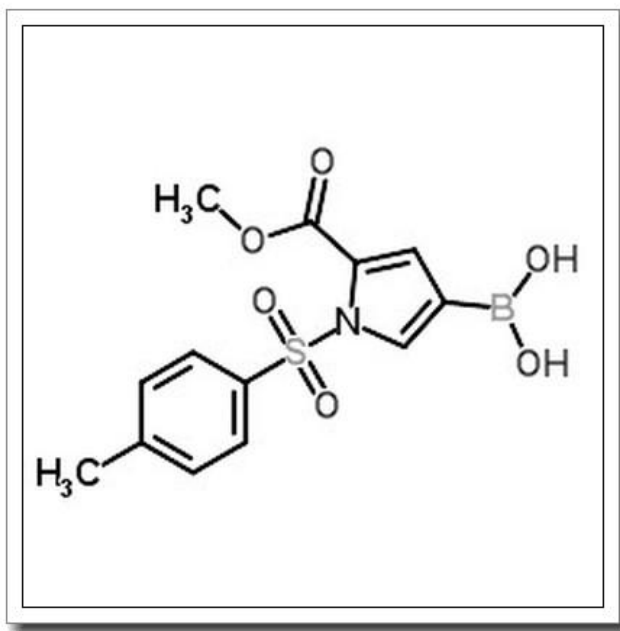


(5-(甲氧基羰基)-1-甲苯磺酰-1H-吡咯-3-基)硼酸

[5-methoxycarbonyl-1-(4-methylphenyl)sulfonylpyrrol-3-yl]boronic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	[5-methoxycarbonyl-1-(4-methylphenyl)sulfonylpyrrol-3-yl]boronic acid
中文名称	(5-(甲氧基羰基)-1-甲苯磺酰-1H-吡咯-3-基)硼酸
CAS 号	916177-00-9
分子式	C ₁₃ H ₁₄ BN ₀ O ₆ S
分子量	323.129
纯度	>96%

产品说明

5-甲氧基羰基-1-(4-甲基苯基)磺酰基吡咯-3-硼酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为[5-甲氧基羰基-1-(4-甲基苯基)磺酰基吡咯-3-基]硼酸, CAS 号为 916177-00-9, 分子式为 C₁₃H₁₄BN₀O₆S, 分子量 323.129。该化合物属于芳基硼酸类衍生物, 结构中同时含有磺酰基和硼酸基团, 使其兼具良好的水溶性与反应活性。纯度经 HPLC 验证大于 96%, 外观为白色至类白色结晶性粉末。

2. 生物化学功能与重要性

作为 Suzuki 偶联反应的关键中间体, 该硼酸衍生物可通过与卤代芳烃的交叉偶联反应构建碳-碳键, 在药物分子砌块合成中具有不可替代的作用。磺酰基的引入增强了化合物的稳定性, 而硼酸基团则提供了与过渡金属催化剂配位的能力, 使其成为多肽修饰和靶向药物开发的重要工具。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要应用于以下领域:

- 3.1 医药研发: 作为 EGFR 抑制剂、抗肿瘤化合物等小分子药物的核心合成中间体
 - 3.2 材料科学: 用于制备有机电致发光材料(OLED)的功能性单体
 - 3.3 生化探针: 修饰蛋白质或核酸以研究生物分子相互作用机制
- 典型使用浓度为 0.1-5 mM, 建议在无水条件下进行反应以获得最佳产率。

4. 储存条件与使用建议

储存于-20℃、避光、干燥的惰性气体环境中, 开封后建议分装使用以避免反复冻融。溶解时优先选用 DMF 或 THF 等无水有机溶剂, 若需水相反应应现配现用。工作溶液在 4℃下稳定期不超过 24 小时。

5. 质量控制与安全信息

批次质检报告包含 HPLC 纯度检测、核磁共振氢谱验证及重金属残留测试。本品对眼睛和呼吸道有刺激性, 操作时应佩戴护目镜和防尘口罩。若不慎接触皮肤, 立即

用大量清水冲洗至少 15 分钟。废弃物处理需符合危险化学品处置规范，建议通过专业机构进行焚化处理。

（注：本说明基于当前研究数据编制，具体应用需结合实验条件优化。更多技术参数可索取 COA 证书。）