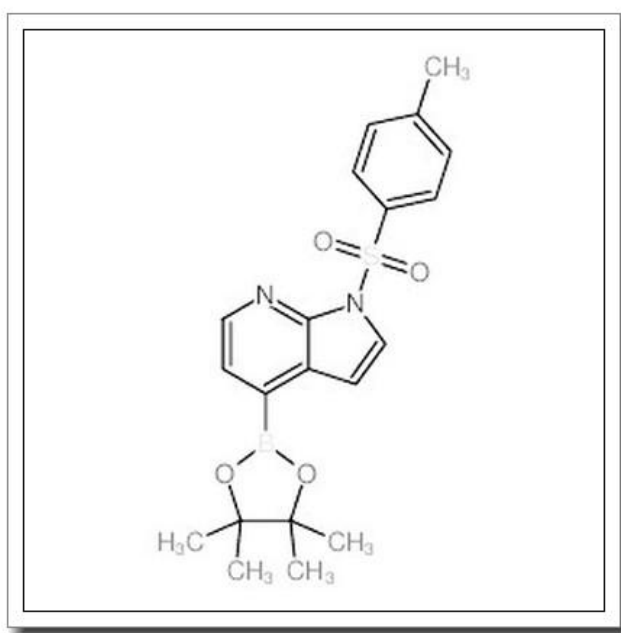


# 1-[(4-甲基苯基)磺酰基]-4-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二噁硼烷-2-基)-1H-吡咯并[2,3-b]吡啶

*1-(4-methylphenyl)sulfonyl-4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)pyrrolo[2,3-b]pyridine*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	1-(4-methylphenyl)sulfonyl-4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)pyrrolo[2,3-b]pyridine
中文名称	1-[(4-甲基苯基)磺酰基]-4-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二噁硼烷-2-基)-1H-吡咯并[2,3-b]吡啶
CAS 号	916176-50-6
分子式	C <sub>20</sub> H <sub>23</sub> BN <sub>2</sub> O <sub>4</sub> S
分子量	398.284

纯度	>96%
----	------

## 产品说明

### 1. 产品概述与化学特性

1-[(4-甲基苯基)磺酰基]-4-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二噁硼烷-2-基)-1H-吡咯并[2,3-b]吡啶 (CAS 号: 916176-50-6) 是一种含硼杂环化合物, 分子式为  $C_{20}H_{23}BN_2O_4S$ , 分子量为 398.284。该化合物以白色至类白色固体形式存在, 纯度高于 96%, 具有稳定的硼酸酯结构 (4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二噁硼烷基团), 同时包含吡咯并[2,3-b]吡啶骨架和对甲苯磺酰基保护基团, 适合作为有机合成中间体或偶联反应试剂。

### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物在 Suzuki-Miyaura 偶联反应中作为关键硼酸酯前体, 能够高效参与碳-碳键形成反应。其吡咯并吡啶结构常见于药物活性分子中, 具有调节生物活性的潜力, 尤其在激酶抑制剂和抗肿瘤药物研发中备受关注。硼酸酯基团的引入显著提升了其水溶性和反应选择性, 适用于复杂生物活性分子的修饰与合成。

### 3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发和有机合成领域, 具体用途包括:

- 作为中间体用于构建含吡咯并吡啶结构的候选药物分子。
- 在靶向药物设计中, 用于偶联芳基或杂芳基片段, 扩展分子多样性。
- 在材料科学中, 参与制备荧光标记物或功能化高分子材料。

### 4. 储存条件与使用建议

建议在  $-20^{\circ}C$  下避光保存, 干燥惰性气体 (如氮气) 环境中密封存放, 以避免吸湿或氧化。使用时需在惰性气氛 (如氩气) 下操作, 溶解于无水有机溶剂 (如 DMSO 或 THF) 后参与反应。开封后建议一次性使用完毕, 或严格隔绝空气分装保存。

### 5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度  $>96\%$ , 并提供 MS 和 NMR 谱图验证结构。安全信息如下:

- 避免吸入粉尘或接触皮肤, 操作时需佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩。

- 如意外接触，立即用大量清水冲洗并就医。
- 废弃物需按危险化学品规范处置，不得直接排放至环境中。