

(1R,3S,4S)-3-[6-(4,4,5,5-Tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-1H-benzimidazol-2-yl]-2-azabicyclo[2.2.1]heptane-2-carboxylic acid 1,1-dimethylethyl ester

产品图片未找到

产品基本信息

属性	值
化学名称	(1R, 3S, 4S)-3-[6-(4, 4, 5, 5-Tetramethyl-1, 3, 2-dioxaborolan-2-yl)-1H-benzimidazol-2-yl]-2-azabicyclo[2. 2. 1]heptane-2-carboxylic acid 1,1-dimethylethyl ester
产品目录号	
CAS 号	1256387-87-7
分子式	C24H34BN3O4
分子量	439. 355
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为(1R, 3S, 4S)-3-[6-(4, 4, 5, 5-四甲基-1, 3, 2-二氧硼杂环戊烷-2-基)-1H-苯并咪唑-2-基]-2-氮杂双环[2. 2. 1]庚烷-2-羧酸叔丁酯, CAS 号为 1256387-87-7, 分子式为 C₂₄H₃₄BN₃O₄, 分子量为 439. 355。该化合物是一种含硼杂环衍生物, 具有独特的立体结构和硼酸酯官能团, 纯度高于 96%, 为白色至类白色固体, 可溶于常见有机溶剂如 DMSO、甲醇和乙腈。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为硼酸酯类中间体, 在生物化学研究中具有重要价值。其苯并咪唑结构和硼酸酯基团使其能够参与 Suzuki-Miyaura 偶联反应, 广泛应用于蛋白质标记、药物分子设计和生物探针合成。此外, 其刚性双环结构可增强与靶标蛋白的结合特异性, 常用于激酶抑制剂和 GPCR 配体的开发。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药研发和化学生物学领域, 具体包括:

- 作为小分子抑制剂的前体, 用于肿瘤和炎症性疾病靶点研究;
- 用于硼中子俘获治疗 (BNCT) 相关药物的合成;
- 作为荧光标记探针的中间体, 应用于细胞成像研究;
- 在有机合成中作为手性构建模块, 用于复杂分子的不对称合成。

4. 储存条件与使用建议

建议在-20° C、干燥避光条件下储存, 开封后需充入惰性气体保护以延长稳定性。使用时需在干燥环境中操作, 避免接触水分以防硼酸酯水解。溶解建议使用无水 DMSO, 配制成母液后分装保存, 避免反复冻融。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度>96%, MS 和 NMR 验证结构。操作时需佩戴防护手套和护目镜, 避免吸入粉尘或接触皮肤。如不慎接触, 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。安全数据表（SDS）可随货提供，请查阅详细毒理学信息。