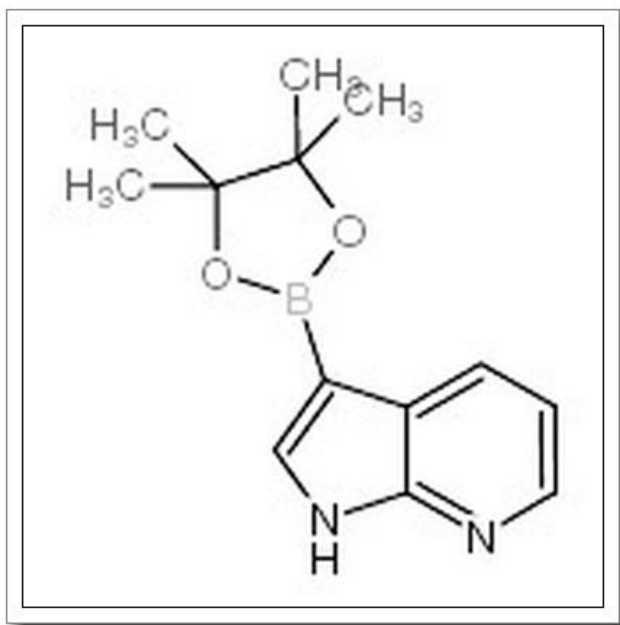


3-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼烷-2-基)-1H-吡咯并[2,3-B]吡啶

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



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-1H-pyrrolo[2,3-b]pyridine
中文名称	3-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼烷-2-基)-1H-吡咯并[2,3-B]吡啶
CAS 号	945256-29-1
分子式	C13H17BN2O2
分子量	244.097
纯度	>96%

产品说明

产品名称: 3-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼烷-2-基)-1H-吡咯并[2,3-B]吡啶

英文名称: 3-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-1H-pyrrolo[2,3-b]pyridine

CAS 号: 945256-29-1

分子式: C₁₃H₁₇BN₂O₂

分子量: 244.097

纯度: >96%

1. 产品概述与化学特性

本品为白色至类白色结晶性粉末，是一种含硼杂环化合物，具有吡咯并吡啶骨架和 4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼烷基团。其分子结构中硼原子的空轨道特性使其可作为重要的有机合成中间体，尤其在 Suzuki-Miyaura 偶联反应中表现出高反应活性。该化合物在常温下稳定，但需避免与强氧化剂接触。

2. 生物化学功能与重要性

作为硼酸酯类衍生物，该化合物在药物化学和材料科学领域具有重要价值。其吡咯并吡啶骨架是多种生物活性分子的核心结构，常见于激酶抑制剂和抗癌药物的设计中。硼酸酯基团可通过温和条件水解为硼酸，进一步参与生物共轭反应，因此在探针分子开发和靶向药物合成中具有广泛应用。

3. 主要应用领域与具体用途

- 医药研发: 用于构建激酶抑制剂（如 JAK/STAT 通路抑制剂）的关键中间体
- 材料科学: 作为有机发光二极管（OLED）材料的前体化合物
- 化学合成: Suzuki 偶联反应中作为芳基硼酸酯供体，实现 C-C 键的高效构建
- 生物标记: 通过硼酸-二醇特异性结合，用于糖类化合物的检测与标记

4. 储存条件与使用建议

储存于-20° C、惰性气体（如氩气）保护的干燥环境中，避免光照和湿气。开封后

建议分装使用，剩余产品需立即充氮密封。使用时需在干燥惰性气氛（如手套箱）中操作，若需溶解建议选用无水 THF 或 DMSO 等脱水溶剂。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度>96%，核磁共振（¹H NMR、¹³C NMR）和质谱（MS）验证结构。安全注意事项：

- 避免吸入粉尘或接触皮肤，操作时需佩戴防护手套和护目镜
- 遇水可能缓慢分解，释放微量硼酸，需在通风橱中处理
- 废弃物应作为有害化学品处置，遵守当地环保法规

注：本说明仅提供基础信息，具体实验方案需根据实际研究需求设计。