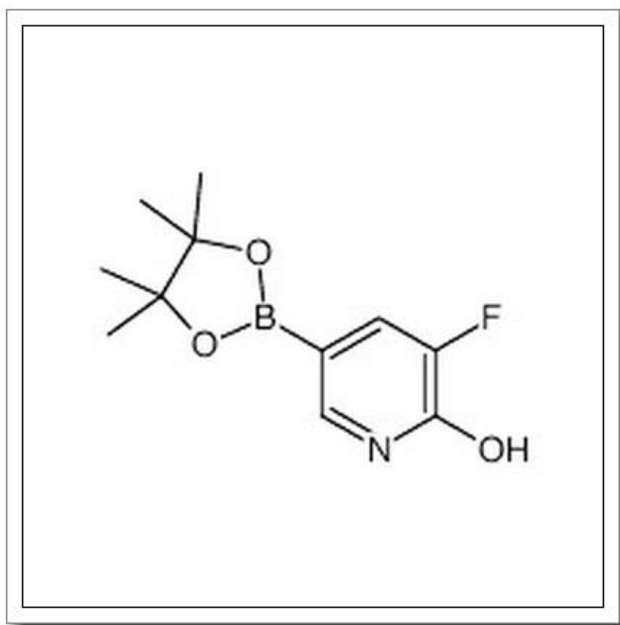


# 3-氟-5-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧杂环戊硼烷-2-基)2-羟基吡啶

*3-fluoro-5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-1H-pyridin-2-one*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	3-fluoro-5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-1H-pyridin-2-one
中文名称	3-氟-5-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧杂环戊硼烷-2-基)2-羟基吡啶
CAS 号	1333319-76-8
分子式	C <sub>11</sub> H <sub>15</sub> BFN <sub>3</sub> O <sub>3</sub>
分子量	239.051
纯度	>96%

## 产品说明

3-氟-5-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧杂环戊硼烷-2-基)2-羟基吡啶 (CAS号: 1333319-76-8) 是一种重要的含硼杂环化合物, 分子式为  $C_{11}H_{15}BFN_3O_3$ , 分子量为 239.051。该化合物以白色至类白色固体形式存在, 纯度通常高于 96%, 具有良好的化学稳定性和反应活性。其结构中的硼酸酯基团和氟取代基使其成为有机合成和药物化学中的关键中间体。

### 1. 产品概述与化学特性

该化合物属于吡啶硼酸酯衍生物, 其分子中的二氧杂环戊硼烷结构 (频哪醇硼酸酯) 可作为 Suzuki-Miyaura 偶联反应的高效硼试剂。氟原子的引入增强了其电子效应和代谢稳定性, 而 2-羟基吡啶骨架则提供了配位能力和氢键作用位点。其熔点和溶解度数据需参考具体实验条件, 建议在干燥惰性气体环境下操作以避免水解。

### 2. 生物化学功能与重要性

作为硼酸类化合物, 它能与生物分子中的羟基或氨基发生特异性相互作用, 在探针设计和靶标识别中具有潜力。氟原子的存在可调节化合物的脂溶性和细胞膜穿透性, 使其在放射性标记和 PET 显影剂开发中受到关注。此外, 该结构片段常见于抗肿瘤和抗感染药物的活性分子设计中。

### 3. 主要应用领域与具体用途

- 医药研发: 用于构建酪氨酸激酶抑制剂、G 蛋白偶联受体调节剂等小分子药物的核心骨架
- 材料科学: 作为有机发光二极管 (OLED) 和液晶材料的合成前体
- 化学生物学: 开发基于硼酸亲和作用的蛋白质标记和糖类识别工具
- 催化研究: 在过渡金属催化反应中作为配体或底物

### 4. 储存条件与使用建议

建议在  $-20^{\circ}C$ 、干燥惰性气氛 (如氩气或氮气) 下密封保存, 避免与湿气和强氧化

剂接触。使用前需在干燥箱中恢复至室温并短暂氮气冲洗。溶解时可选用无水 DMF 或 THF 等有机溶剂，水相反应需严格控制 pH 值（推荐 pH 7-9 缓冲体系）。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测确认纯度 >96%，批次间提供核磁（<sup>1</sup>H NMR、<sup>13</sup>C NMR）和质谱（HRMS）验证数据。操作时需佩戴防护手套和护目镜，皮肤接触后立即用大量清水冲洗。其粉尘可能引起呼吸道刺激，应在通风橱中处理。废弃物需按危险化学品规范处置，避免释放至环境中。

（注：具体安全数据请参阅随货提供的 MSDS 文件，非专业人员请在指导下使用。）