

5-(4,4,5,5-Tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)nicotinaldehyde

产品图片未找到

产品基本信息

属性	值
化学名称	5-(4,4,5,5-Tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)nicotinaldehyde
产品目录号	
CAS 号	848093-29-8
分子式	C ₁₂ H ₁₆ BN ₃ O ₃
分子量	233.071
纯度	>96%

产品说明

5-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼杂环戊烷-2-基)烟醛产品说明书

产品概述与化学特性

本产品为硼酸酯类有机化合物，化学名称为 5-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼杂环戊烷-2-基)烟醛，CAS 号为 848093-29-8，分子式为 C₁₂H₁₆BN₃O₃，分子量 233.071。其结构包含烟醛骨架与频哪醇硼酸酯基团，纯度经 HPLC 验证大于 96%，常温下呈白色至类白色结晶粉末，需避光保存。该化合物在有机溶剂如二甲基亚砜（DMSO）和四氢呋喃（THF）中具有良好溶解性，但在水中溶解度较低。

生物化学功能与重要性

作为硼酸酯衍生物，该产品在 Suzuki-Miyaura 偶联反应中表现出高反应活性，可作为关键中间体用于构建含吡啶环的共轭体系。其醛基官能团可通过缩合反应进一步衍生化，而硼酸酯基团则赋予其与卤代芳烃的交叉偶联能力，在药物化学和材料科学中具有重要价值。

主要应用领域与具体用途

1. 药物研发：用于合成激酶抑制剂、抗肿瘤药物等靶向分子，尤其是含吡啶硼酸结构的先导化合物。
2. 材料科学：作为有机发光二极管（OLED）和共价有机框架（COF）材料的构建单元。
3. 化学合成：在复杂分子骨架构建中作为多功能砌块，适用于多步合成反应。

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，有效期 24 个月。开封后建议分装使用，避免反复冻融。操作时需在通风橱中进行，佩戴防护手套及护目镜。溶解建议使用无水级有机溶剂，并严格排除水分以避免硼酸酯水解。

质量控制与安全信息

本产品经核磁共振（¹H NMR、¹³C NMR）和质谱（MS）验证结构，HPLC 检测纯度 ≥96%。安全数据表明，其可能对眼睛和皮肤有刺激性，CAS 号为 848093-29-8 的

化合物暂无 GHS 分类，但建议按一般化学品规范处理。废弃物应作为有害化学废物处置，避免直接接触或吸入粉尘。