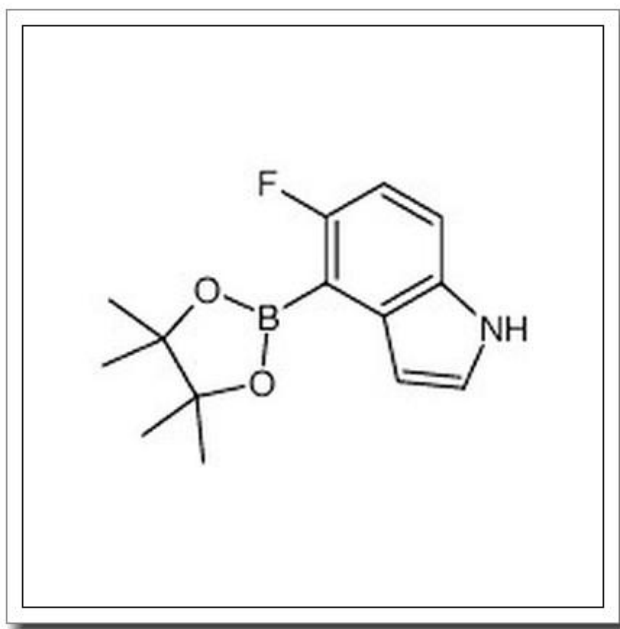


5-Fluoro-4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-1H-indole

5-Fluoro-4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-1H-indole



产品基本信息

属性	值
化学名称	5-Fluoro-4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-1H-indole
中文名称	5-Fluoro-4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-1H-indole
CAS 号	1072009-08-5
分子式	C ₁₄ H ₁₇ BFN ₂ O ₂
分子量	261.1
纯度	>96%

产品说明

5-氟-4-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼杂环戊烷-2-基)-1H-吡啶产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为含硼吡啶类化合物，化学名称为 5-氟-4-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼杂环戊烷-2-基)-1H-吡啶，CAS 号为 1072009-08-5。其分子式为 C₁₄H₁₇BFN₂O₂，分子量 261.1，纯度经 HPLC 验证大于 96%。该化合物以白色至类白色结晶粉末形式存在，结构中同时包含吡啶骨架和硼酸酯基团，兼具芳香杂环的稳定性和硼原子的配位活性，在有机溶剂如 DMSO、甲醇中具有良好溶解性。

2. 生物化学功能与重要性

作为 Suzuki-Miyaura 偶联反应的关键中间体，其硼酸酯基团可与卤代芳烃发生高效交叉偶联，广泛应用于复杂分子构建。5-位氟原子的引入显著增强化合物的电子效应和代谢稳定性，使其在药物化学中成为修饰生物活性的重要位点。该结构单元常见于抗肿瘤、抗抑郁等药物先导化合物的设计中，尤其适用于靶向蛋白激酶抑制剂的开发。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于医药研发和有机合成领域。在药物发现阶段，可作为构建吡啶类衍生物的硼化试剂，用于合成具有潜在生物活性的小分子库。在材料科学中，可用于制备有机发光二极管 (OLED) 的含硼电子传输材料。具体应用场景包括但不限于：蛋白酶抑制剂的结构优化、PET 显影剂前体合成、以及作为金属有机框架 (MOF) 的配体修饰组分。

4. 储存条件与使用建议

建议在惰性气体保护下密封保存，长期储存温度应低于 -20℃，短期使用可存放于 2-8℃ 干燥环境。开封后需在手套箱中操作，避免接触水汽。使用时建议用无水 THF 或甲苯作为反应溶剂，并加入适量碳酸钾作为碱促进反应。实验表明，其在 pH 6-8 的水溶液中稳定性较好，但需避免与强氧化剂共存。

5. 质量控制与安全信息

本产品经质谱（MS）和核磁共振（NMR）双重验证，符合药物研发级标准。危险代码 H302-H315-H319-H335，表明其具有吞咽毒性、皮肤刺激性及呼吸道刺激风险。操作时应佩戴护目镜和丁腈手套，在通风橱中进行称量。如接触皮肤，需立即用大量清水冲洗 15 分钟。废弃物处理需遵守当地法规，建议采用硼酸专用中和剂处理。

注：本说明书中数据基于实验室测试环境，实际应用需根据具体实验条件进行优化。更多技术参数可索取 COA 证书。