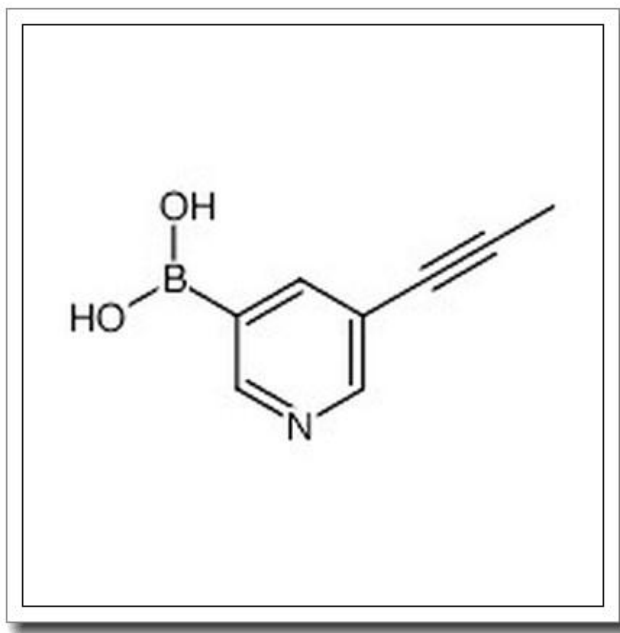


[5-(丙炔-1-基)吡啶-3-基]硼酸

(5-(Prop-1-yn-1-yl)pyridin-3-yl)boronic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	(5-(Prop-1-yn-1-yl)pyridin-3-yl)boronic acid
中文名称	[5-(丙炔-1-基)吡啶-3-基]硼酸
CAS 号	917471-30-8
分子式	C ₈ H ₈ BN ₂ O ₂
分子量	160.966
纯度	>96%

产品说明

5-(丙炔-1-基)吡啶-3-基硼酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为(5-(Prop-1-yn-1-yl)pyridin-3-yl)boronic acid, 中文名称为[5-(丙炔-1-基)吡啶-3-基]硼酸, CAS 号为 917471-30-8, 分子式为 C₈H₈BN₀O₂, 分子量为 160.966。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 纯度>96%, 属于含硼芳香杂环衍生物, 兼具吡啶环的碱性和硼酸基团的亲电性, 可溶于甲醇、二甲基亚砷等极性有机溶剂, 微溶于水。其结构中丙炔基与硼酸基团的协同作用使其成为重要的有机合成砌块。

2. 生物化学功能与重要性

作为硼酸类化合物, 该产品可通过 Suzuki-Miyaura 偶联反应与卤代芳烃高效构建碳-碳键, 在药物分子设计中广泛应用于芳环拼接。吡啶环的氮原子提供配位位点, 可用于金属催化反应的配体修饰。丙炔基的引入增强了分子的平面刚性和电子离域能力, 在荧光探针和材料科学领域具有独特价值。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要应用于以下领域: 医药研发中作为激酶抑制剂、抗肿瘤药物的关键中间体; 材料科学中用于制备有机光电材料; 作为荧光标记物的前体化合物。具体用途包括但不限于: Suzuki 偶联反应底物、金属有机框架材料 (MOFs) 合成单体、蛋白质相互作用研究中的小分子探针。

4. 储存条件与使用建议

建议储存于-20℃、惰性气体保护下的干燥环境中, 避免光照和潮湿。开封后需充氩气密封保存, 保质期为 24 个月。使用时应佩戴防护手套和护目镜, 在通风橱中操作。溶解时建议先用少量 DMSO 助溶, 再稀释至所需浓度。避免与强氧化剂、强酸接触。

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。安全数据表明：该化合物可能引起眼睛和皮肤刺激，吸入或食入有害。操作时应遵循 GHS 分类：H302-H315-H319-H335。废弃物需按危险化学品规范处置。提供完整的 COA（质量分析证书）和 MSDS（材料安全数据表）备案。