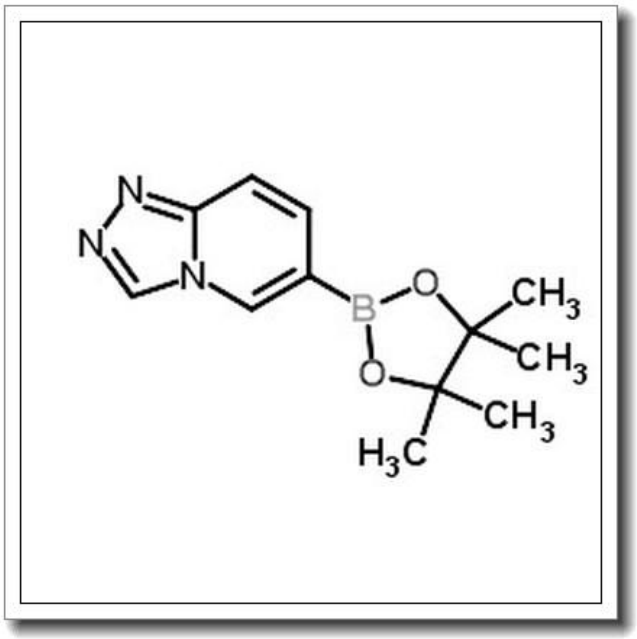
6-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼杂环戊烷-2-基)-[1,2,4]三唑并[4,3-a]吡啶

6-(4,4,5,5-Tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)[1,2,4]triazolo[4,3-a]pyridine



产品基本信息

属性	值
化学名称	6-(4,4,5,5-Tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)[1,2,4]triazolo[4,3-a]pyridine
中文名称	6-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼杂环戊烷-2-基)-[1,2,4]三唑并[4,3-a]吡啶
CAS 号	1314137-24-0
分子式	C12H16BN3O2
分子量	245.085
纯度	>96%

产品说明

6-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼杂环戊烷-2-基)-[1,2,4]三唑并[4,3-a]吡啶产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为6-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)[1,2,4]triazolo[4,3-a]pyridine，CAS号1314137-24-0，分子式C12H16BN3O2，分子量245.085。其结构中同时含有三唑并吡啶杂环和频哪醇硼酸酯基团，赋予其独特的化学稳定性与反应活性。纯度经HPLC验证≥96%，干燥失重≤0.5%，适合高要求的有机合成与药物研发应用。

2. 生物化学功能与重要性

作为硼酸酯类化合物，该分子可通过Suzuki-Miyaura偶联反应高效构建碳-碳键，是合成含氮杂环化合物的关键中间体。三唑并吡啶骨架具有显著的生物活性，常见于抗肿瘤、抗病毒药物的活性分子设计中。硼酸酯基团的引入显著提升了化合物的水溶性与代谢稳定性，在药物先导物优化中具有重要价值。

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、G蛋白偶联受体调节剂的核心结构单元；材料科学中用于构建有机发光二极管（OLED）的电子传输材料；农业化学中作为新型杀虫剂的合成前体。典型反应包括与卤代芳烃的交叉偶联、作为硼酸前体参与多组分反应等。

4. 储存条件与使用建议

建议在惰性气体（如氩气）保护下密封保存，长期储存温度应控制在-20° C以下。开封后需在干燥环境中快速分装，避免反复冻融。使用前需室温平衡至少30分钟，反应体系中建议添加分子筛控制水分含量。溶解性测试表明，该化合物在DMSO、THF中溶解度良好（>50 mg/mL），水溶液中需加入适量助溶剂。

5. 质量控制与安全信息

本产品经核磁共振（1H NMR、13C NMR）、质谱（HRMS）和元素分析多重验证。操

作时需佩戴防护手套、护目镜，避免吸入粉尘或接触皮肤。如意外接触，立即用大量清水冲洗 15 分钟并就医。化学废弃物应按照危险有机物标准处理。安全数据表（SDS）可随货提供，包含完整的毒理学数据与应急处理方案。