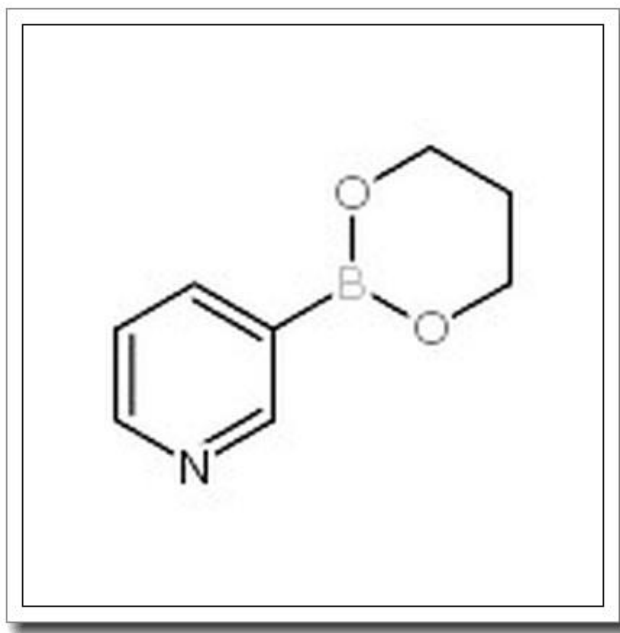


吡啶-3-硼酸

pyridine-3-boronic acid 1,3-propanediol cyclic ester



产品基本信息

属性	值
化学名称	pyridine-3-boronic acid 1,3-propanediol cyclic ester
中文名称	吡啶-3-硼酸
CAS 号	131534-65-1
分子式	C ₈ H ₁₀ BN ₂ O ₂
分子量	162.981
纯度	>96%

产品说明

吡啶-3-硼酸 (pyridine-3-boronic acid 1,3-propanediol cyclic ester) 是一种重要的有机硼化合物, CAS 号为 131534-65-1, 分子式为 C₈H₁₀BN₂O₂, 分子量为 162.981。该化合物以吡啶环为骨架, 硼酸基团通过 1,3-丙二醇环状酯的形式稳定存在, 纯度通常高于 96%。其结构兼具硼酸的亲电性和吡啶环的配位能力, 在有机合成和药物化学中具有广泛的应用价值。

1. 产品概述与化学特性

吡啶-3-硼酸为白色至类白色结晶或粉末, 可溶于常见有机溶剂如二甲基亚砜 (DMSO) 和四氢呋喃 (THF), 但在水中溶解度较低。其硼酸酯结构显著提高了化合物的稳定性, 减少了游离硼酸的自缩合倾向, 便于储存和反应操作。该化合物的硼原子可作为路易斯酸中心, 参与多种偶联反应。

2. 生物化学功能与重要性

吡啶-3-硼酸是 Suzuki-Miyaura 偶联反应的关键中间体, 能够与芳基卤化物高效偶联构建碳-碳键。其吡啶环可作为配体与金属中心结合, 在催化反应中发挥重要作用。此外, 该结构片段常见于药物分子设计中, 可用于开发激酶抑制剂和抗菌剂等活性化合物。

3. 主要应用领域与具体用途

- 医药中间体: 用于合成含吡啶骨架的靶向药物分子。
- 材料科学: 作为有机光电材料的构建模块。
- 化学合成: 参与 Suzuki 偶联、Chan-Lam 偶联等交叉偶联反应。
- 配体设计: 修饰金属催化剂以提高反应选择性。

4. 储存条件与使用建议

建议在 2-8°C、干燥惰性气体 (如氩气) 保护下避光保存, 开封后需充氮密封。使用时应避免接触强氧化剂和强酸, 反应体系需严格除氧除水以获得最佳效果。实验操作需在通风橱中进行。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度 >96%，并提供核磁共振（NMR）和质谱（MS）表征数据。该化合物对眼睛和皮肤有刺激性，操作时需佩戴防护手套和护目镜。若不慎接触，应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应按照国家危险化学品处理规范处置。