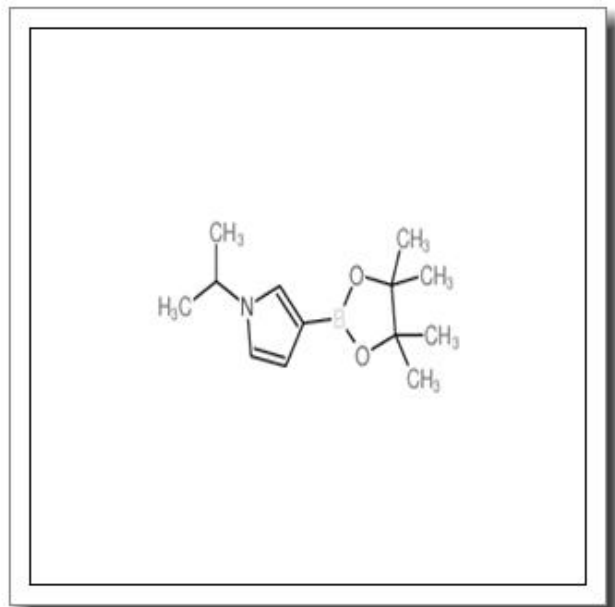


1-(1-甲基乙基)-3-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二噁硼烷-2-基)-1H-吡咯

1-propan-2-yl-3-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)pyrrole



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-propan-2-yl-3-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)pyrrole
中文名称	1-(1-甲基乙基)-3-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二噁硼烷-2-基)-1H-吡咯
CAS 号	439813-84-0
分子式	C ₁₃ H ₂₂ BN ₂ O ₂
分子量	235.13
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为 1-propan-2-yl-3-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)pyrrole, 中文名称为 1-(1-甲基乙基)-3-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二噁硼烷-2-基)-1H-吡咯, CAS 号为 439813-84-0。其分子式为 $C_{13}H_{22}BN_2O_2$, 分子量为 235.13, 纯度不低于 96%。该化合物是一种含硼杂环衍生物, 结构中包含吡咯环和硼酸酯基团, 具有独特的电子特性和化学反应活性。其硼酸酯基团在交叉偶联反应中表现出优异的稳定性, 适合作为有机合成中间体。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物在生物化学领域主要用于硼酸酯介导的偶联反应, 如 Suzuki-Miyaura 反应, 是构建碳-碳键的重要工具。其吡咯环结构赋予其潜在的配位能力, 可与金属催化剂协同作用, 提高反应效率。此外, 含硼化合物在药物研发中常用于靶向分子的修饰, 以改善药物的溶解性和生物利用度。

3. 主要应用领域与具体用途

本品广泛应用于医药中间体合成、材料科学及有机光电材料研发。在医药领域, 可用于抗肿瘤药物或抗菌剂的分子构建; 在材料科学中, 可作为有机发光二极管 (OLED) 或半导体材料的前体。具体用途包括但不限于: 硼酸酯保护基的引入、过渡金属催化反应的底物、功能化高分子材料的单体。

4. 储存条件与使用建议

建议在干燥、避光、惰性气体 (如氮气) 保护下储存, 温度控制在 $2-8^{\circ}C$, 以延长保质期。使用前需恢复至室温并避免接触水分, 以防硼酸酯水解。实验操作应在通风橱中进行, 并佩戴防护手套和护目镜。溶解性测试表明, 本品易溶于常见有机溶剂 (如 THF、二氯甲烷), 可根据反应需求选择适当溶剂。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和 NMR 严格检测, 确保纯度 $\geq 96\%$ 。安全数据表明, 该化合物对眼睛和皮肤有刺激性, 操作时应避免直接接触。如不慎吸入或接触, 应立即用大量清

水冲洗并就医。废弃物需按危险化学品处理规范处置，禁止直接排放至环境中。详细安全信息请参考产品提供的材料安全数据表（MSDS）。