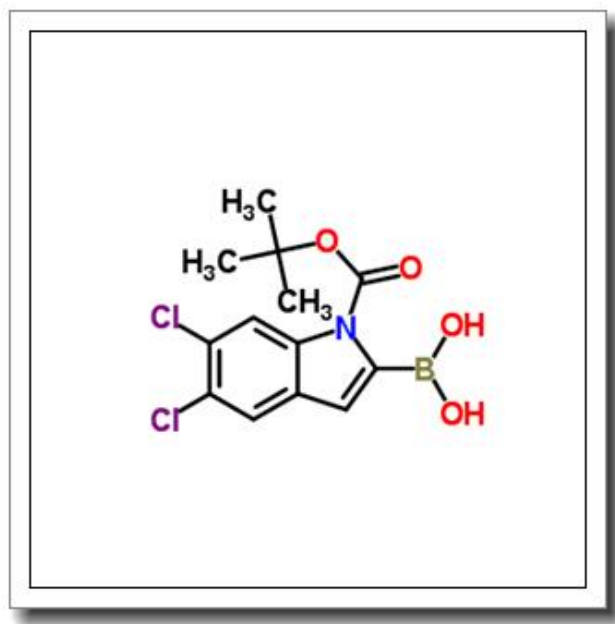


1-Boc-5,6-二氯-1H-吲哚-2-硼酸

[5,6-dichloro-1-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonyl]indol-2-yl]boronic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	[5,6-dichloro-1-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonyl]indol-2-yl]boronic acid
中文名称	1-Boc-5,6-二氯-1H-吲哚-2-硼酸
CAS 号	1310384-28-1
分子式	C ₁₃ H ₁₄ BCl ₂ N ₀₄
分子量	329.972
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

1-Boc-5,6-二氯-1H-吡啶-2-硼酸 (CAS 号: 1310384-28-1) 是一种有机硼酸衍生物, 化学式为 $C_{13}H_{14}BCl_2N_2O_4$, 分子量为 329.972。该化合物以白色至类白色固体形式存在, 纯度通常不低于 96%。其结构特征为吡啶环上 5,6 位被氯原子取代, 2 位连接硼酸基团, 1 位氮原子由 Boc (叔丁氧羰基) 保护。这种保护基团增强了化合物的稳定性, 使其在有机合成中更易于操作。

2. 生物化学功能与重要性

作为硼酸类化合物, 1-Boc-5,6-二氯-1H-吡啶-2-硼酸在 Suzuki-Miyaura 偶联反应中表现出高反应活性, 是构建复杂杂环分子的关键中间体。其硼酸基团可与卤代芳烃或烯烃发生交叉偶联, 形成碳-碳键, 广泛应用于药物分子和功能材料的合成。此外, 吡啶骨架在生物活性分子中普遍存在, 使得该化合物在药物研发中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于医药和材料科学领域。在药物研发中, 它是合成抗肿瘤、抗病毒及中枢神经系统药物的重要砌块。例如, 可用于构建含吡啶结构的激酶抑制剂或 G 蛋白偶联受体调节剂。在材料科学中, 可用于制备有机发光二极管 (OLED) 或光电材料的功能性中间体。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 下避光干燥储存, 以延长稳定性。使用时需在惰性气体 (如氮气或氩气) 保护下操作, 避免接触水分或空气, 防止硼酸基团水解。溶解时可选用四氢呋喃、二甲基亚砜等无水溶剂。实验操作需佩戴防护手套和护目镜, 确保通风良好。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和核磁共振 (NMR) 严格检测, 确保纯度 $\geq 96\%$ 。安全信息方面,

该化合物可能对眼睛、皮肤和呼吸道有刺激性，操作时应避免直接接触。若不慎吸入或接触，应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物需按危险化学品规范处置。

以上信息仅供科研使用，不可用于诊断或治疗用途。具体实验方案需结合文献和专业指导进行。