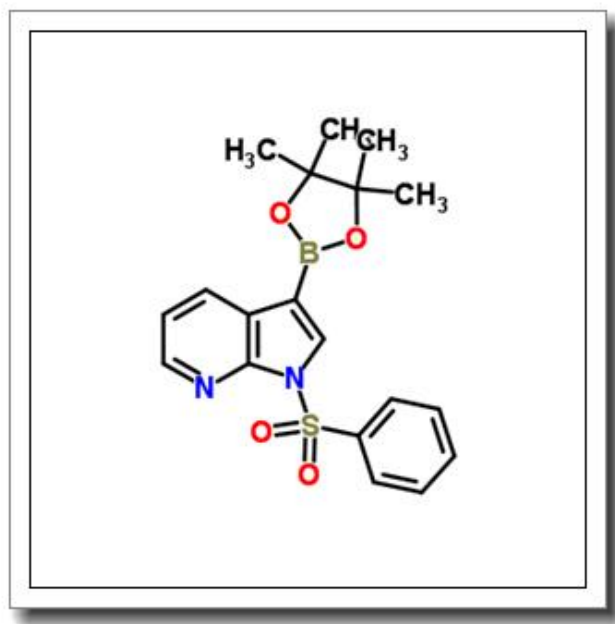


1-苯磺酰基吡咯并吡啶-3-硼酸酯

1-(Benzenesulfonyl)-1H-Pyrrolo[2,3-b]Pyridine-3-Boronic Acid Pinacol Ester



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-(Benzenesulfonyl)-1H-Pyrrolo[2,3-b]Pyridine-3-Boronic Acid Pinacol Ester
中文名称	1-苯磺酰基吡咯并吡啶-3-硼酸酯
CAS 号	886547-94-0
分子式	C ₁₉ H ₂₁ BN ₂ O ₄ S
分子量	384.257
纯度	≥ 96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

1-苯磺酰基吡咯并吡啶-3-硼酸酯 (CAS 号: 886547-94-0) 是一种有机硼酸酯类化合物, 分子式为 $C_{19}H_{21}BN_2O_4S$, 分子量为 384.257。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%。其结构中的硼酸酯基团和苯磺酰基使其在有机合成中具有较高的反应活性, 尤其是作为 Suzuki-Miyaura 偶联反应的关键中间体。该化合物在常温下稳定, 但需避免与强氧化剂或强酸接触。

2. 生物化学功能与重要性

1-苯磺酰基吡咯并吡啶-3-硼酸酯在药物化学和材料科学领域具有重要价值。其硼酸酯基团能够与卤代芳烃或烯烃发生高效的偶联反应, 广泛应用于构建复杂杂环骨架。此外, 吡咯并吡啶结构是许多生物活性分子的核心片段, 因此该化合物在开发抗肿瘤、抗病毒及中枢神经系统药物中具有潜在应用价值。

3. 主要应用领域与具体用途

该化合物主要用于以下领域:

- 药物研发: 作为关键中间体用于合成具有生物活性的吡咯并吡啶衍生物。
- 材料科学: 参与构建有机光电材料或功能高分子材料的共轭结构。
- 化学研究: 用于 Suzuki-Miyaura 偶联反应, 扩展芳环或杂环化合物的结构多样性。

4. 储存条件与使用建议

建议将本品置于干燥、避光的环境中, 储存温度为 2-8°C。开封后需充入惰性气体 (如氮气) 保护, 以避免吸湿或氧化。使用时需在干燥惰性气氛 (如氩气) 下操作, 避免直接暴露于空气。溶解性测试表明, 该化合物易溶于二甲基亚砜 (DMSO) 和四氢呋喃 (THF), 但在水中溶解度较低。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过高效液相色谱 (HPLC) 和核磁共振 (NMR) 进行质量控制, 确保纯度 $\geq 96\%$ 。安全信息如下:

- 避免吸入粉尘或接触皮肤，操作时需佩戴防护手套、护目镜及实验服。
- 如不慎接触眼睛或皮肤，立即用大量清水冲洗并就医。
- 废弃物需按照有机硼化合物处理规范进行处置。
- 具体安全数据请参考产品提供的材料安全数据表（MSDS）。