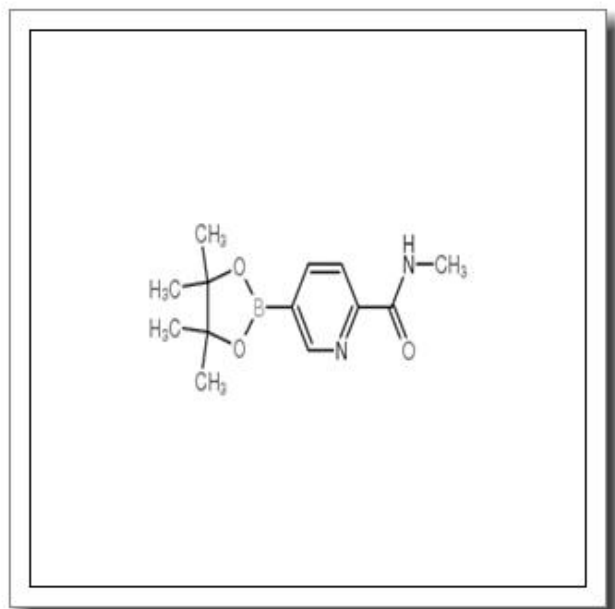


# 2-(N-甲基氨基羰基)吡啶-5-硼酸频那醇酯

*N-Methyl-5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)picolinamide*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	N-Methyl-5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)picolinamide
中文名称	2-(N-甲基氨基羰基)吡啶-5-硼酸频那醇酯
CAS 号	945863-21-8
分子式	C <sub>13</sub> H <sub>19</sub> BN <sub>2</sub> O <sub>3</sub>
分子量	262.113
纯度	≥96%

## 产品说明

N-Methyl-5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)picolinamide  
产品说明书

### 1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 N-Methyl-5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)picolinamide, 中文名为 2-(N-甲基氨基羰基)吡啶-5-硼酸频那醇酯, CAS 号为 945863-21-8。其分子式为  $C_{13}H_{19}BN_2O_3$ , 分子量为 262.113, 纯度  $\geq 96\%$ 。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 具有硼酸频那醇酯的典型稳定性, 可溶于常见有机溶剂如二甲基亚砜 (DMSO) 和甲醇, 但在水中溶解度较低。

### 2. 生物化学功能与重要性

作为吡啶类硼酸酯衍生物, 该化合物是 Suzuki-Miyaura 交叉偶联反应的关键中间体, 其硼酸酯基团在钯催化条件下可与卤代芳烃高效偶联。N-甲基酰胺结构的引入增强了分子极性, 使其在药物化学中成为修饰生物活性的重要基团。该分子兼具硼酸酯的反应活性和酰胺基的氢键形成能力, 在构建杂环化合物和生物活性分子中具有独特价值。

### 3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发和材料科学领域。在药物化学中, 用于构建含吡啶骨架的激酶抑制剂、抗菌剂及抗肿瘤化合物。在材料领域, 可作为有机发光二极管 (OLED) 和共轭聚合物的合成前体。具体用途包括: 作为 EGFR 抑制剂类药物的关键中间体, 用于构建 C-C 键的偶联反应, 以及作为硼酸保护形式参与多步合成。

### 4. 储存条件与使用建议

建议在  $-20^{\circ}C$ 、惰性气体 (如氩气) 保护下避光保存, 开封后需充氮密封。使用前需平衡至室温以避免结露。溶解时优先选用无水 DMSO, 配制溶液建议现配现用。反应体系中需严格除氧, 推荐搭配  $Pd(PPh_3)_4$  等钯催化剂使用。

### 5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度  $\geq 96\%$ , 残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。安全数据: 急性毒性

(口服, 大鼠) LD<sub>50</sub>>500 mg/kg, 操作时需佩戴防护手套和护目镜。避免吸入粉尘, 如接触皮肤应立即用大量清水冲洗。废弃物需按危险化学品规范处置。

注: 本说明基于现有研究数据, 实际应用前请查阅最新文献并开展小试实验。