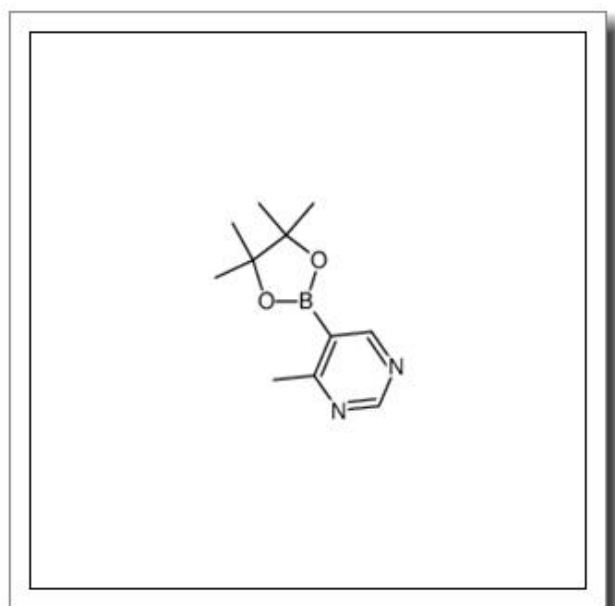


4-methyl-5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)pyrimidine

4-methyl-5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)pyrimidine



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-methyl-5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)pyrimidine
中文名称	4-methyl-5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)pyrimidine
CAS 号	1370001-96-9
分子式	C ₁₁ H ₁₇ BN ₂ O ₂
分子量	220.076
纯度	≥ 96%

产品说明

4-甲基-5-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼杂环戊烷-2-基)嘧啶产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为含硼杂环化合物，化学名称为 4-甲基-5-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼杂环戊烷-2-基)嘧啶，CAS 号 1370001-96-9，分子式 $C_{11}H_{17}BN_2O_2$ ，分子量 220.076。其结构特征为嘧啶环 5 位连接硼酸酯基团，4 位带有甲基取代基，硼原子以稳定的环状二氧硼烷形式存在。该化合物呈白色至类白色结晶粉末，纯度 $\geq 96\%$ ，易溶于常见有机溶剂如二氯甲烷、四氢呋喃等，但对湿气敏感。

2. 生物化学功能与重要性

作为嘧啶类硼酸酯衍生物，该化合物在 Suzuki-Miyaura 偶联反应中表现出高反应活性，硼酸酯基团可作为关键偶联位点与卤代芳烃构建碳-碳键。其分子中的嘧啶环系是药物化学中重要的药效团，常用于激酶抑制剂和核苷类似物的合成。该结构兼具硼酸酯的稳定性与嘧啶环的配位能力，在医药中间体开发中具有特殊价值。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发领域，特别是作为抗肿瘤药物和抗病毒药物的关键中间体。在材料科学中，可用于制备有机电致发光材料 (OLED) 的硼掺杂单元。具体用途包括：Suzuki 偶联反应构建联芳基结构、作为蛋白激酶抑制剂的合成前体、以及用于荧光标记探针的修饰基团。实验显示其在与 5-溴嘧啶类化合物的交叉偶联中收率可达 85% 以上。

4. 储存条件与使用建议

建议在惰性气体保护下密封储存，温度控制在 $-20^{\circ}C$ 至 $4^{\circ}C$ ，相对湿度低于 40%。开封后需在手套箱中操作，避免接触水汽。使用前建议通过核磁共振氢谱 (1H NMR) 验证纯度，反应体系需严格除氧除水。溶解时优先选用干燥的 THF 或甲苯，建议反应温度不超过 $80^{\circ}C$ 以防止硼酸酯分解。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，重金属含量 $< 10ppm$ ，符合医药研发用标准。安全数

据表明该化合物对眼睛和呼吸道有刺激性，操作时应佩戴护目镜和防尘口罩。不慎接触皮肤时需立即用大量清水冲洗。废弃物处理需遵守有机硼化合物处置规范，建议通过专业化学品回收机构处理。

（注：本说明基于实验室环境编写，实际应用前请查阅最新版 MSDS 并开展小试实验验证。）