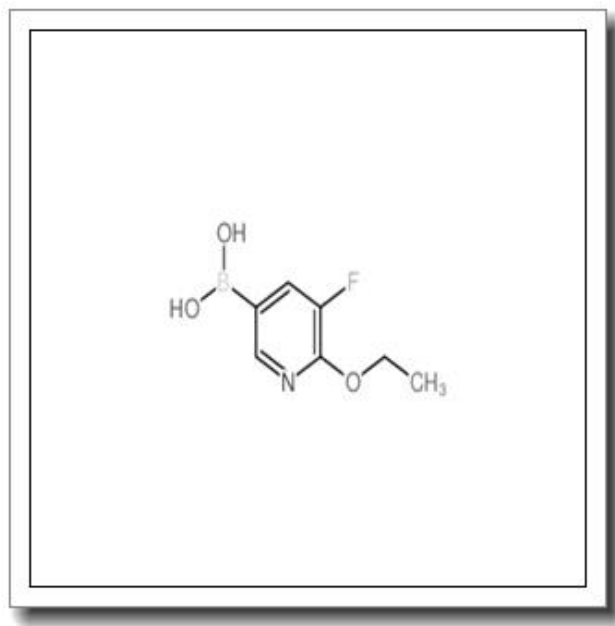


(6-乙氧基-5-氟吡啶-3-基)硼酸

(6-Ethoxy-5-fluoropyridin-3-yl)boronic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	(6-Ethoxy-5-fluoropyridin-3-yl)boronic acid
中文名称	(6-乙氧基-5-氟吡啶-3-基)硼酸
CAS 号	1309982-57-7
分子式	C7H9BFN03
分子量	184.961
纯度	≥96%

产品说明

(6-乙氧基-5-氟吡啶-3-基)硼酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

(6-乙氧基-5-氟吡啶-3-基)硼酸 (英文名: (6-Ethoxy-5-fluoropyridin-3-yl)boronic acid) 是一种有机硼酸类化合物, CAS 号为 1309982-57-7, 分子式为 $C_7H_9BFNO_3$, 分子量为 184.961。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 纯度 $\geq 96\%$, 具有典型的硼酸官能团 ($-B(OH)_2$) 和吡啶环结构, 其中乙氧基和氟原子分别位于吡啶环的 6 位和 5 位。其化学性质稳定, 但在强酸或强碱条件下可能发生水解或分解反应。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为硼酸衍生物, 在有机合成中表现出显著的偶联反应活性, 尤其是作为 Suzuki-Miyaura 交叉偶联反应的关键中间体。其结构中的硼酸基团可与卤代芳烃或烯烃在钯催化剂作用下形成碳-碳键, 而吡啶环上的氟原子和乙氧基则提供了额外的反应位点修饰可能性, 使其在药物化学和材料科学中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

(6-乙氧基-5-氟吡啶-3-基)硼酸主要用于以下领域:

- 医药研发: 作为构建含氟吡啶类药物的关键砌块, 用于抗肿瘤、抗感染等小分子药物的合成。
- 材料科学: 参与制备有机光电材料或液晶材料的中间体。
- 农药化学: 用于含氟农药活性分子的结构修饰。

具体用途包括 Suzuki 偶联、Chan-Lam 偶联等过渡金属催化反应, 以及作为硼酸保护基的前体。

4. 储存条件与使用建议

储存条件: 需密封保存于 $2-8^{\circ}C$ 干燥环境中, 避免与湿气、氧化剂接触。长期储存建议充入惰性气体 (如氮气) 保护。

使用建议:

- 反应前需确认溶剂无水（如 THF、DMF 需严格除水）。
- 建议在惰性气氛（氩气/氮气）下进行偶联反应。
- 避免与强酸、强碱或重金属离子直接接触。

5. 质量控制与安全信息

质量控制：通过 HPLC 测定纯度 $\geq 96\%$ ，核磁共振（ ^1H NMR、 ^{13}C NMR）和质谱（MS）验证结构，水分含量 $\leq 0.5\%$ 。

安全信息：

- 安全术语（H 短语）：H302（吞咽有害）、H315（皮肤刺激）、H319（严重眼刺激）、H335（可能引起呼吸道刺激）。
- 防护措施：操作时佩戴防尘口罩、化学护目镜及丁腈手套，在通风橱中进行称量。
- 应急处理：接触皮肤后立即用大量清水冲洗，误食需就医。

本产品仅供科研用途，不适用于医药、食品或家庭使用。