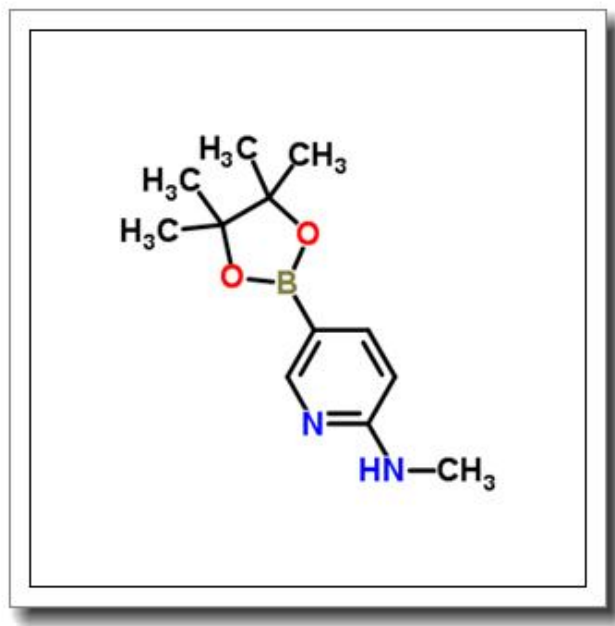


6-(甲基氨基)-3-吡啶硼酸频那醇酯

N-methyl-5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)pyridin-2-amine



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)pyridin-2-amine
中文名称	6-(甲基氨基)-3-吡啶硼酸频那醇酯
CAS 号	1005009-98-2
分子式	C ₁₂ H ₁₉ BN ₂ O ₂
分子量	234.102
纯度	≥ 96%

产品说明

6-(甲基氨基)-3-吡啶硼酸频那醇酯产品说明书

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)pyridin-2-amine, 是一种含硼杂环化合物, 属于吡啶硼酸酯类衍生物。其分子式为 C₁₂H₁₉BN₂O₂, 分子量为 234.102, CAS 号为 1005009-98-2。该化合物以白色至类白色结晶粉末形式存在, 纯度 ≥96%, 具有频那醇硼酯特有的稳定结构, 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 Suzuki-Miyaura 偶联反应的关键中间体, 该化合物通过硼酸酯基团与卤代芳烃的钯催化交叉偶联, 高效构建碳-碳键。其吡啶环上的甲基氨基修饰增强了分子极性, 使其在药物化学中成为优化化合物亲脂性和靶点结合能力的重要结构单元。在蛋白激酶抑制剂和神经受体调节剂的研发中具有特殊价值。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发和有机合成领域:

- 作为抗肿瘤药物 (如 ALK 抑制剂) 和中枢神经系统药物的关键合成砌块
- 用于构建 PET 显影剂的硼酸前体化合物
- 在材料科学中合成有机光电功能分子
- 作为金属有机框架 (MOF) 材料的配体修饰组分

4. 储存条件与使用建议

建议在惰性气体 (如氩气) 保护下密封保存, 储存温度 -20° C 至 4° C, 避免光照和潮湿环境。开封后建议分装使用并立即充入保护气体。使用时应佩戴防护手套和护目镜, 在通风橱中操作。溶解时优先选用无水级溶剂, 反应体系需严格除氧以防止硼酸酯水解。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC、NMR 和质谱进行批次质量控制, 确保杂质含量符合药物研发标准。该化

合物对眼睛和皮肤有刺激性, CAS 号 1005009-98-2 已列入 GHS 分类: H302 (吞咽有害)、H315 (皮肤刺激)。泄漏处理需使用惰性吸附材料, 废弃物应作为危险化学品处置。提供完整的 COA (分析证书) 和 MSDS (材料安全数据表) 备查。