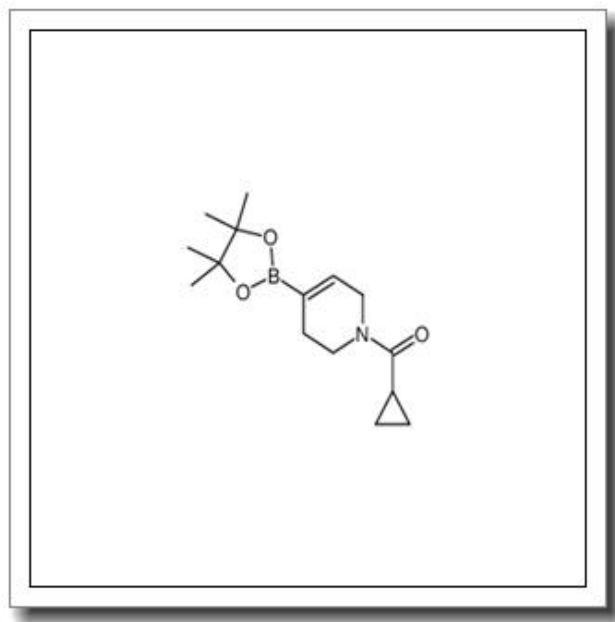


cyclopropyl-[4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-3,6-dihydro-2H-pyridin-1-yl]methanone

cyclopropyl-[4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-3,6-dihydro-2H-pyridin-1-yl]methanone



产品基本信息

属性	值
化学名称	cyclopropyl-[4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-3,6-dihydro-2H-pyridin-1-yl]methanone
中文名称	cyclopropyl-[4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-3,6-dihydro-2H-pyridin-1-yl]methanone
CAS 号	1616388-38-5
分子式	C ₁₅ H ₂₄ BN ₃ O ₃
分子量	277.167

纯度	$\geq 96\%$
----	-------------

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为环丙基-[4-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼杂环戊烷-2-基)-3,6-二氢-2H-吡啶-1-基]甲酮 (CAS 号: 1616388-38-5), 分子式 C₁₅H₂₄BN₃O₃, 分子量 277.167, 纯度 ≥96%。该化合物是一种含硼杂环衍生物, 结构中同时包含二氧硼杂环戊烷和吡啶环骨架, 具有显著的化学稳定性和反应活性。其硼酸酯基团可作为关键官能团参与 Suzuki-Miyaura 偶联反应, 是医药中间体和材料科学领域的重要砌块。

2. 生物化学功能与重要性

作为硼酸酯类化合物, 本品在过渡金属催化下能与芳基卤化物高效偶联, 广泛应用于碳-碳键构建。其环丙基甲酮结构可增强分子刚性, 提升与生物靶标的结合特异性, 在激酶抑制剂和抗肿瘤药物研发中具有潜在价值。该分子还可作为荧光探针前体, 用于生物标记和分子影像学研究。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要应用于以下领域:

- 1) 医药研发: 作为关键中间体用于合成抗肿瘤、抗炎及中枢神经系统药物, 特别是含氮杂环类候选化合物。
- 2) 材料科学: 参与构建有机光电材料 (如 OLED 发光层材料) 的共轭骨架。
- 3) 化学生物学: 通过硼酸酯交换反应实现生物大分子标记和修饰。

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, 温度控制在 -20° C 至 4° C 范围内, 避光防潮。开封后需在干燥环境中快速分装使用。溶解时优先选用无水 THF 或 DMSO 等惰性溶剂, 反应体系应严格除氧以避免硼酸酯水解。建议在通风橱中操作, 避免直接接触皮肤和眼睛。

5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC 检测纯度 ≥96%, 残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。MSDS 数据显示其属于

刺激性化学品（GHS 分类：Skin Irrit. 2），操作时需佩戴防护手套和护目镜。
如发生泄漏，应采用惰性吸附材料处理。废弃物应作为危险化学品处置，遵守当地环保法规。长期储存建议定期检测纯度变化，出现结块或变色时应停止使用。