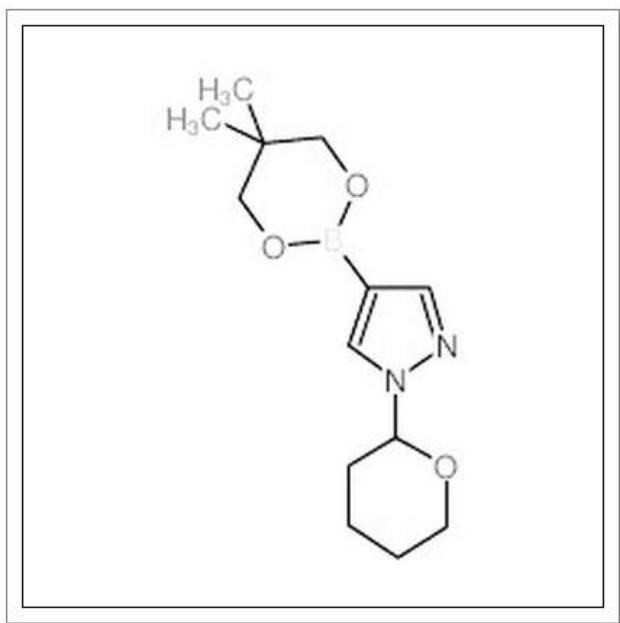


1-(2-四氢吡喃基)-1H-吡唑-4-硼酸新戊二醇酯

1-(2-Tetrahydropyranyl)-1H-pyrazole-4-boronic acid neopentyl glycol ester



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-(2-Tetrahydropyranyl)-1H-pyrazole-4-boronic acid neopentyl glycol ester
中文名称	1-(2-四氢吡喃基)-1H-吡唑-4-硼酸新戊二醇酯
CAS 号	1072944-26-3
分子式	C13H21BN2O3
分子量	264.128
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

1-(2-四氢吡喃基)-1H-吡唑-4-硼酸新戊二醇酯 (CAS 号: 1072944-26-3) 是一种有机硼酸酯类化合物, 分子式为 $C_{13}H_{21}BN_2O_3$, 分子量为 264.128。该化合物以吡唑环为核心结构, 通过四氢吡喃基和新戊二醇酯的修饰, 显著提高了其稳定性和溶解性。其纯度通常高于 96%, 适合用于高要求的合成反应。该化合物在常温下为白色至类白色固体, 需避光保存以避免降解。

2. 生物化学功能与重要性

作为硼酸酯衍生物, 该化合物在 Suzuki-Miyaura 偶联反应中表现出优异的反应活性, 能够与卤代烃或三氟甲磺酸酯高效偶联, 形成碳-碳键。其四氢吡喃基 (THP) 保护基团可增强分子稳定性, 同时新戊二醇酯结构进一步提高了其储存和操作便利性。这类硼酸酯在药物化学和材料科学中具有重要价值, 尤其在构建杂环化合物时不可或缺。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品广泛应用于医药中间体、有机发光材料 (OLED) 及高分子材料的合成。在药物研发中, 它常用于构建含吡唑结构的活性分子, 如抗炎、抗肿瘤药物的先导化合物。此外, 在材料科学领域, 它可作为功能单体参与聚合反应, 用于制备高性能聚合物或光电材料。

4. 储存条件与使用建议

建议将产品密封保存于 $-20^{\circ}C$ 至 $4^{\circ}C$ 的干燥环境中, 避免与湿气或强氧化剂接触。使用前需恢复至室温并确保环境干燥, 以维持其反应活性。溶解时推荐使用无水四氢呋喃 (THF) 或二甲基亚砜 (DMSO) 等惰性溶剂。操作时需在有惰性气体 (如氮气或氩气) 保护下进行, 以防止水解或氧化。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过高效液相色谱 (HPLC) 和核磁共振 (NMR) 严格质量控制, 确保批次间一致性。安全方面, 该化合物对眼睛和皮肤有轻微刺激性, 操作时应佩戴防护手套

和护目镜。若不慎接触，需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物需按危险化学品规范处置，避免环境污染。