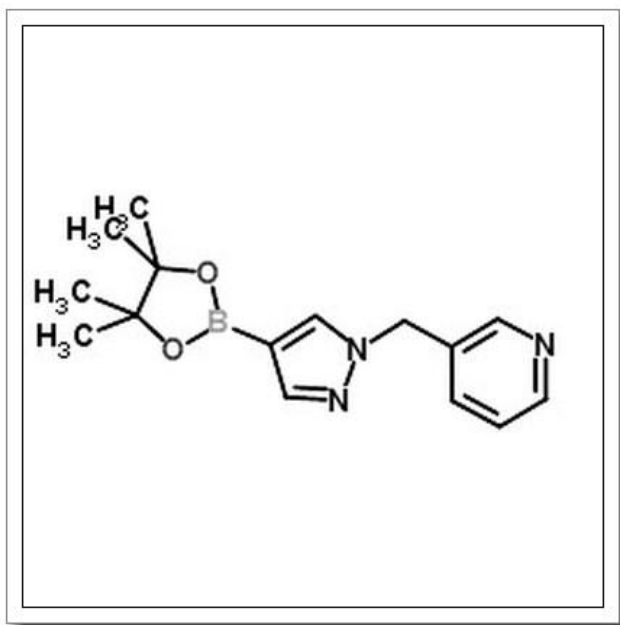


1-(3-吡啶甲基)-1H-吡唑-4-硼酸频哪醇酯

3-[[4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)pyrazol-1-yl]methyl]pyridine



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-[[4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)pyrazol-1-yl]methyl]pyridine
中文名称	1-(3-吡啶甲基)-1H-吡唑-4-硼酸频哪醇酯
CAS 号	864754-21-2
分子式	C ₁₅ H ₂₀ BN ₃ O ₂
分子量	285.149
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

1-(3-吡啶甲基)-1H-吡唑-4-硼酸频哪醇酯 (CAS 号: 864754-21-2) 是一种含硼杂环化合物, 分子式为 $C_{15}H_{20}BN_3O_2$, 分子量为 285.149。该化合物以吡啶和吡唑为母核, 通过硼酸频哪醇酯修饰, 具有稳定的硼酸酯结构。其纯度高于 96%, 外观通常为白色至类白色固体或粉末。该化合物在有机溶剂 (如二甲基亚砜、甲醇) 中溶解性良好, 但在水中溶解度较低, 需注意避光、防潮保存。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为硼酸酯类衍生物, 在有机合成和药物化学中具有重要价值。其硼酸频哪醇酯基团可作为 Suzuki-Miyaura 偶联反应的关键中间体, 广泛应用于碳-碳键的构建。吡啶和吡唑双杂环结构赋予其良好的配位能力和生物活性潜力, 使其在金属有机框架 (MOF) 材料、酶抑制剂设计和抗癌药物开发等领域受到关注。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于以下领域:

- 药物研发: 作为小分子抑制剂或靶向药物的合成砌块, 尤其用于激酶抑制剂的设计。
- 材料科学: 参与构建功能性高分子材料或光电材料。
- 化学合成: 作为 Suzuki 偶联反应的硼酸酯供体, 用于合成联芳基或杂芳基化合物。
- 生物标记: 通过硼酸酯与生物分子的特异性结合, 开发荧光探针或诊断试剂。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 、干燥惰性气体 (如氮气) 环境下避光保存, 开封后需充氮密封。使用前需恢复至室温并避免反复冻融。实验操作应在通风橱中进行, 佩戴防护手套和护目镜。溶解时优先选择无水有机溶剂 (如 DMSO), 若需水相反应, 建议加入适量助溶剂。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和 NMR 严格检测，确保纯度>96%。安全数据如下：

- 潜在危害：可能对眼睛、皮肤和呼吸道产生刺激，避免直接接触。
- 应急处理：如接触皮肤，立即用大量清水冲洗；若吸入，转移至空气新鲜处。
- 废弃物处理：按危险化学品规范处置，不可直接排入环境。

注：具体实验方案需结合文献优化，建议查阅最新研究进展或咨询专业技术支持。