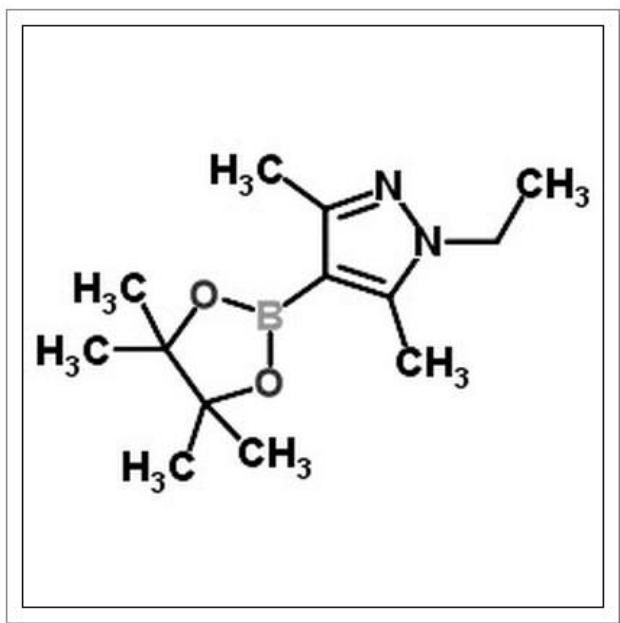


1-乙基-3,5-二甲基-4-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二噁硼烷-2-基)-1H-吡唑

1-ethyl-3,5-dimethyl-4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)pyrazole



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-ethyl-3,5-dimethyl-4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)pyrazole
中文名称	1-乙基-3,5-二甲基-4-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二噁硼烷-2-基)-1H-吡唑
CAS 号	1082503-79-4
分子式	C ₁₃ H ₂₃ BN ₂ O ₂
分子量	250.145
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

1-乙基-3,5-二甲基-4-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二噁硼烷-2-基)-1H-吡唑 (CAS号: 1082503-79-4) 是一种含硼杂环化合物, 分子式为 $C_{13}H_{23}BN_2O_2$, 分子量为 250.145。该化合物以吡唑环为核心结构, 通过硼酸酯基团 (4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二噁硼烷) 修饰, 具有较高的化学稳定性和反应活性。其纯度大于 96%, 适合用于有机合成和药物研发中的关键中间体反应。

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 Suzuki-Miyaura 偶联反应中表现出优异的催化性能, 能够高效构建碳-碳键。其吡唑环结构赋予其潜在的生物活性, 可用于药物分子设计中的靶向修饰。此外, 硼酸酯基团在生物正交化学和探针标记领域具有重要应用价值, 是开发新型荧光标记物或蛋白质相互作用研究工具的理想选择。

3. 主要应用领域与具体用途

- 有机合成: 作为关键中间体, 用于构建含吡唑环的复杂分子, 如抗癌药物或抗炎化合物的合成。
- 药物研发: 用于先导化合物的结构优化, 通过硼酸酯基团引入提高药物分子的靶向性和代谢稳定性。
- 材料科学: 参与制备有机光电材料或功能性高分子聚合物。
- 化学生物学: 作为探针前体, 用于活细胞标记或生物分子相互作用研究。

4. 储存条件与使用建议

- 储存条件: 建议在 $-20^{\circ}C$ 下避光保存, 置于干燥惰性气体 (如氮气) 环境中, 以防止吸湿和氧化。
- 使用建议: 使用前需恢复至室温并充分干燥。反应体系中需严格除氧除水, 建议在氩气或氮气保护下操作。溶解时可选用无水四氢呋喃或二甲基亚砜等极性溶剂。

5. 质量控制与安全信息

- 质量控制: 产品通过 HPLC 和 NMR 验证纯度, 批号关联完整分析证书 (COA)。

- 安全信息: 该化合物对眼睛和皮肤有刺激性, 操作时需佩戴防护手套、护目镜及实验服。若接触皮肤, 立即用大量清水冲洗。废弃物应按照国家有机硼化合物规范处置, 避免释放至环境中。

本产品仅供科研用途, 不适用于医药或食品领域。