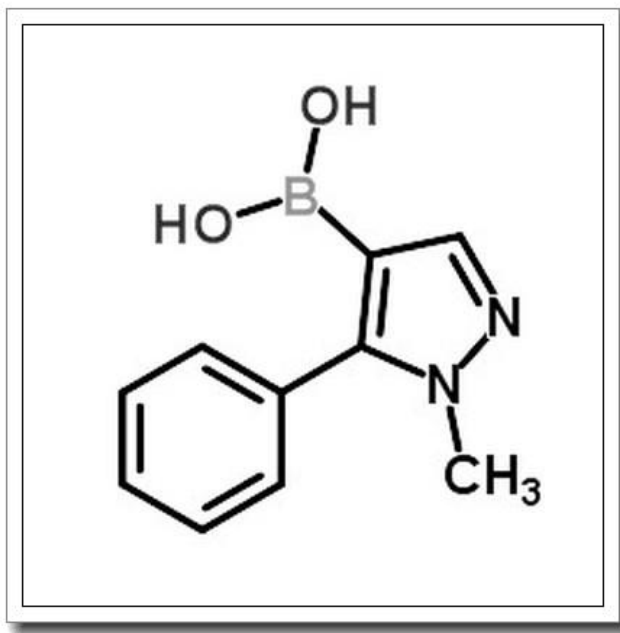


(1-甲基-5-苯基-1H-吡唑-4-基)硼酸

(1-Methyl-5-phenyl-1H-pyrazol-4-yl)boronic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	(1-Methyl-5-phenyl-1H-pyrazol-4-yl)boronic acid
中文名称	(1-甲基-5-苯基-1H-吡唑-4-基)硼酸
CAS 号	1858252-28-4
分子式	C ₁₀ H ₁₁ BN ₂ O ₂
分子量	202.018
纯度	>96%

产品说明

(1-甲基-5-苯基-1H-吡唑-4-基) 硼酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为(1-Methyl-5-phenyl-1H-pyrazol-4-yl)boronic acid，分子式 C₁₀H₁₁BN₂O₂，分子量 202.018，CAS 号 1858252-28-4。其结构中含吡唑环与苯环共轭体系，硼酸基团赋予其作为 Suzuki-Miyaura 偶联反应关键中间体的特性。纯度经 HPLC 验证 ≥96%，熔点为 210-215°C（分解），易溶于二甲基亚砜（DMSO）、甲醇等极性有机溶剂，微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为芳基硼酸类化合物，该分子可通过硼酸基团与卤代芳烃发生高效交叉偶联反应，在碳-碳键形成中表现出高区域选择性和官能团兼容性。其吡唑骨架具有配位能力，可作为金属有机框架（MOF）或催化剂的构建模块，在药物化学中常用于激酶抑制剂等活性分子的结构修饰。

3. 主要应用领域与具体用途

- 3.1 医药研发：用于构建抗肿瘤、抗炎药物候选分子，如 EGFR 抑制剂的核心片段。
- 3.2 材料科学：作为有机光电材料（OLED、OPV）的前体，参与共轭聚合物合成。
- 3.3 化学合成：在 Suzuki 反应中作为硼酸供体，高效制备联芳基化合物。

4. 储存条件与使用建议

- 4.1 储存：密封保存于惰性气体（如氩气）保护的干燥器中，温度-20°C 以下，避光防潮。
- 4.2 使用：建议在手套箱中称量，反应体系中需加入适量碱（如 K₂CO₃）促进硼酸活化。溶解时优先选用脱气有机溶剂。

5. 质量控制与安全信息

- 5.1 质量控制：批次提供 HPLC 谱图、¹H NMR 及质谱验证数据，符合 Reaxys 标准。

5.2 安全警示：对眼睛和呼吸道有刺激性，操作时需佩戴护目镜、防尘口罩及丁腈手套。若接触皮肤，立即用大量清水冲洗。废弃物应作为有害化学品处置，避免与强氧化剂共存。

（注：本说明基于现有研究数据，实际应用前请查阅最新文献并开展小试实验。）