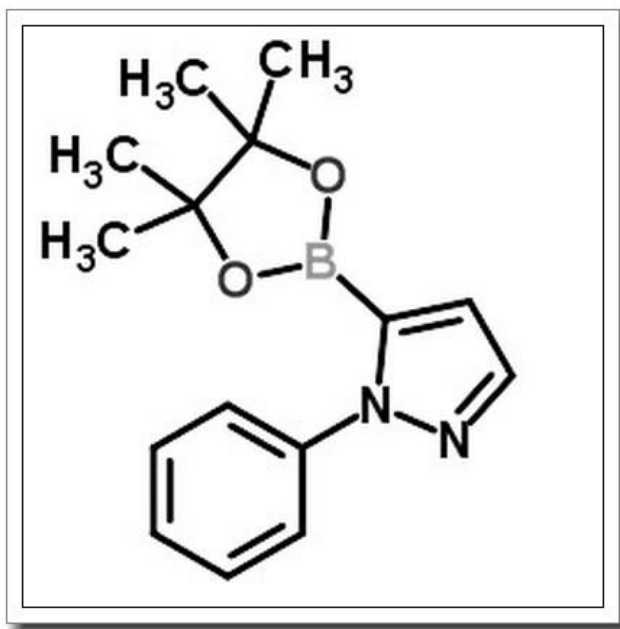


# 1-苯基-5-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二噁硼烷-2-基)-1H-吡唑

*1-phenyl-5-(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-phenyl-5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)pyrazole
中文名称	1-苯基-5-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二噁硼烷-2-基)-1H-吡唑
CAS 号	1238702-58-3
分子式	C <sub>15</sub> H <sub>19</sub> BN <sub>2</sub> O <sub>2</sub>
分子量	270.135
纯度	>96%

## 产品说明

### 1. 产品概述与化学特性

1-苯基-5-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二噁硼烷-2-基)-1H-吡唑 (CAS 号: 1238702-58-3) 是一种含硼有机化合物, 分子式为  $C_{15}H_{19}BN_2O_2$ , 分子量为 270.135。该化合物以吡唑环为核心结构, 苯基和 4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二噁硼烷基团分别取代于吡唑环的 1 位和 5 位。其纯度高于 96%, 外观通常为白色至类白色结晶或粉末, 具有良好的化学稳定性和溶解性, 可溶于常见有机溶剂如二甲基亚砜 (DMSO)、四氢呋喃 (THF) 等。

### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为硼酸酯类衍生物, 在有机合成中表现出显著的偶联反应活性, 尤其是作为 Suzuki-Miyaura 交叉偶联反应的关键中间体。其硼酸酯基团可与卤代烃或三氟甲磺酸酯在钯催化剂作用下高效形成碳-碳键, 广泛应用于复杂分子骨架的构建。此外, 吡唑环结构赋予其潜在的生物活性, 在药物化学和材料科学领域具有重要研究价值。

### 3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于医药中间体、功能材料及精细化学品的合成。在药物研发中, 常用于构建含吡唑结构的靶向分子或激酶抑制剂; 在材料科学领域, 可作为有机发光二极管 (OLED) 或液晶材料的前体。此外, 其硼酸酯特性也适用于生物标记和分子探针的制备。

### 4. 储存条件与使用建议

建议在  $-20^{\circ}C$ 、干燥避光条件下密封保存, 避免与湿气接触以防止硼酸酯水解。使用时需在惰性气体 (如氮气或氩气) 保护下操作, 溶解后建议短期内使用完毕。实验过程中应佩戴防护手套和护目镜, 确保通风良好。

### 5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测确认纯度  $\geq 96\%$ , 并提供完整的质谱 (MS) 和核磁共振 (NMR) 表征数据。安全数据表明, 该化合物可能对眼睛和皮肤有刺激性, 操作时

应避免直接接触。如不慎接触，需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地化学品管理法规。

(全文共计 436 字)