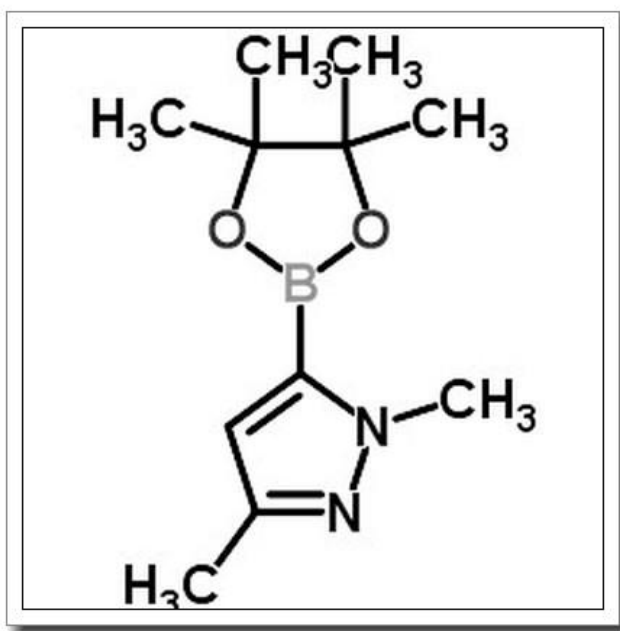


1,3-二甲基-5-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二噁硼烷-2-基)-1H-吡唑

1,3-Dimethyl-5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-1H-pyrazole



产品基本信息

属性	值
化学名称	1,3-Dimethyl-5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-1H-pyrazole
中文名称	1,3-二甲基-5-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二噁硼烷-2-基)-1H-吡唑
CAS 号	847818-79-5
分子式	C ₁₁ H ₁₉ BN ₂ O ₂
分子量	222.092
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

1, 3-二甲基-5-(4, 4, 5, 5-四甲基-1, 3, 2-二噁硼烷-2-基)-1H-吡唑 (CAS 号: 847818-79-5) 是一种含硼杂环化合物, 分子式为 $C_{11}H_{19}BN_2O_2$, 分子量为 222.092。该化合物以白色至类白色固体形式存在, 纯度高于 96%, 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)、甲醇和乙腈。其结构中的硼酸酯基团使其成为 Suzuki-Miyaura 偶联反应中的重要中间体。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为硼酸酯衍生物, 在有机合成中表现出显著的活性, 尤其是作为吡唑类硼酸酯, 能够高效参与过渡金属催化的交叉偶联反应。其独特的结构设计使其在构建复杂杂环体系时具有高选择性和反应效率, 因此在药物化学和材料科学领域具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品广泛应用于医药研发、有机合成及材料科学领域。具体用途包括:

- 作为关键中间体用于合成靶向药物分子, 尤其是含吡唑结构的抗癌和抗炎化合物。
- 在 Suzuki-Miyaura 偶联反应中作为硼酸酯供体, 构建碳-碳键。
- 用于开发新型光电材料或配体, 如有机发光二极管 (OLED) 材料的合成。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 下避光干燥储存, 长期保存需充入惰性气体 (如氮气) 以保持稳定性。使用时需在干燥惰性气氛 (如氩气) 下操作, 避免接触水分或强氧化剂。溶解时建议使用无水溶剂, 并确保反应体系严格除氧。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和 NMR 严格检测, 纯度 $\geq 96\%$ 。使用时需穿戴防护装备 (手套、护目镜和实验服), 避免吸入粉尘或接触皮肤。若不慎接触, 立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应按照当地法规处理, 避免环境污染。

(全文共计 436 字)