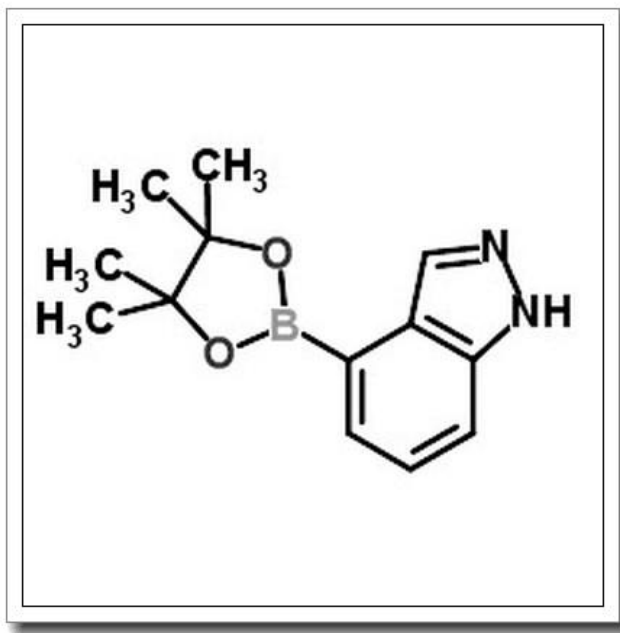


1H-吲唑-4-硼酸频哪醇酯

4-(4,4,5,5-Tetramethyl-[1,3,2]Dioxaborolan-2-yl)-1H-Indazole



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-(4,4,5,5-Tetramethyl-[1,3,2]Dioxaborolan-2-yl)-1H-Indazole
中文名称	1H-吲唑-4-硼酸频哪醇酯
CAS 号	885618-33-7
分子式	C ₁₃ H ₁₇ BN ₂ O ₂
分子量	244.097
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

4-(4,4,5,5-Tetramethyl-[1,3,2]Dioxaborolan-2-yl)-1H-Indazole (中文名称: 1H-吡唑-4-硼酸频哪醇酯, CAS 号: 885618-33-7) 是一种有机硼化合物, 分子式为 $C_{13}H_{17}BN_2O_2$, 分子量为 244.097。该化合物以白色至类白色固体形式存在, 纯度高于 96%, 具有稳定的硼酸酯结构。其化学结构中包含吡唑环和频哪醇硼酸酯基团, 使其在有机合成中表现出优异的反应活性, 尤其在 Suzuki-Miyaura 偶联反应中作为关键中间体。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为硼酸酯衍生物, 在药物化学和材料科学领域具有重要价值。其硼酸酯基团可与卤代芳烃发生高效的交叉偶联反应, 广泛应用于构建复杂芳环结构。吡唑环作为 privileged scaffold, 常见于多种生物活性分子中, 因此该化合物在开发激酶抑制剂、抗肿瘤药物和抗炎药物中具有潜在应用价值。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于医药研发和有机合成领域。在药物发现中, 它可作为关键中间体用于合成靶向性小分子药物, 尤其是涉及吡唑骨架的化合物。在材料科学中, 可用于制备有机光电材料或配体修饰。具体用途包括但不限于: Suzuki 偶联反应底物、激酶抑制剂前体、金属有机框架 (MOF) 材料合成配体。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 下避光干燥储存, 长期保存需充惰性气体保护。开封后需在干燥氮气环境中操作, 避免反复冻融。使用时应在惰性气氛 (如氩气或氮气) 下进行, 避免接触水分和强氧化剂。溶解性测试表明其易溶于二甲基亚砜 (DMSO)、四氢呋喃 (THF) 等有机溶剂, 配制溶液建议现配现用。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC、NMR 和质谱进行严格质量控制, 确保批次间稳定性。安全数据表明其属于刺激性化学品, 操作时应穿戴防护手套、护目镜和实验服, 避免吸入粉尘

或接触皮肤。如意外接触，需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地危险化学品管理规定，建议通过专业机构进行无害化处理。