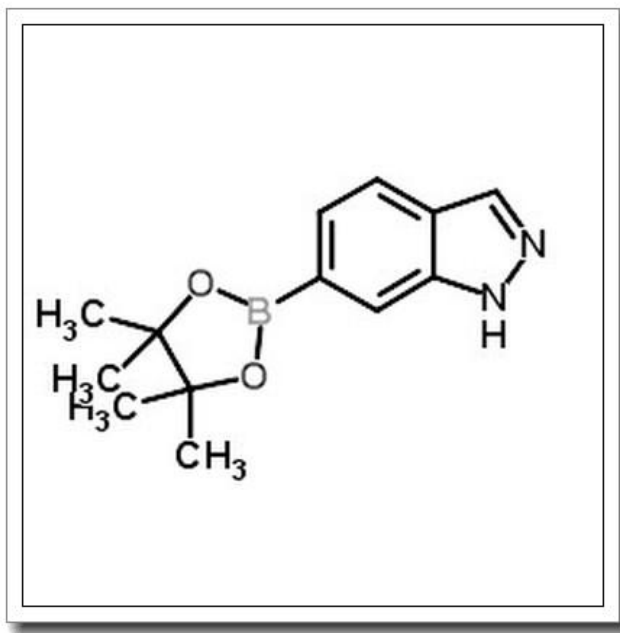


1H-吡唑-6-硼酸频哪醇酯

1H-Indazole-6-boronic Acid Pinacol Ester



产品基本信息

属性	值
化学名称	1H-Indazole-6-boronic Acid Pinacol Ester
中文名称	1H-吡唑-6-硼酸频哪醇酯
CAS 号	937049-58-6
分子式	C ₁₃ H ₁₇ BN ₂ O ₂
分子量	244.097
纯度	>96%

产品说明

1H-吡唑-6-硼酸频哪醇酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

1H-吡唑-6-硼酸频哪醇酯（化学名称：1H-Indazole-6-boronic Acid Pinacol Ester, CAS 号：937049-58-6）是一种重要的有机硼化合物，分子式为 $C_{13}H_{17}BN_2O_2$ ，分子量 244.097。该化合物以白色至类白色结晶或粉末形式存在，纯度高于 96%，具有良好的化学稳定性和溶解性，可溶于多种有机溶剂如二甲基亚砜（DMSO）、四氢呋喃（THF）等。其结构中的硼酸频哪醇酯基团使其成为 Suzuki-Miyaura 偶联反应中的关键中间体。

2. 生物化学功能与重要性

作为硼酸酯类衍生物，1H-吡唑-6-硼酸频哪醇酯在药物化学和材料科学中具有重要价值。其吡唑骨架是多种生物活性分子的核心结构，能够参与构建激酶抑制剂、抗肿瘤药物及抗炎化合物。硼酸酯基团的引入显著提升了化合物的反应活性，使其成为碳-碳键形成反应的高效试剂，尤其在复杂分子合成中不可或缺。

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。在医药领域，它是合成靶向药物（如 PARP 抑制剂）的关键中间体；在有机合成中，常用于 Suzuki 偶联反应，构建芳基-芳基或芳基-杂环结构；此外，在光电材料研发中也可作为功能化前体。具体实验用途包括但不限于：新药先导化合物筛选、分子探针制备及高分子材料改性。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 、干燥惰性气体（如氩气）保护下避光保存，长期储存需置于密封容器中。使用前需平衡至室温并避免接触水分，以防硼酸酯水解。实验操作应在通风橱中进行，佩戴防护手套及护目镜。溶解时优先选用无水溶剂，并建议现配现用以保证反应效率。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 验证纯度>96%，批次间质量稳定。安全数据表明，该化合物可能对眼睛、皮肤及呼吸系统造成刺激，操作时需遵循 GHS 标准，危险代码为 H315-H319-H335。如接触皮肤，立即用大量清水冲洗；若吸入，应转移至空气新鲜处。废弃物处理需符合当地化学品管理法规，禁止直接排放至环境中。

（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验证。）