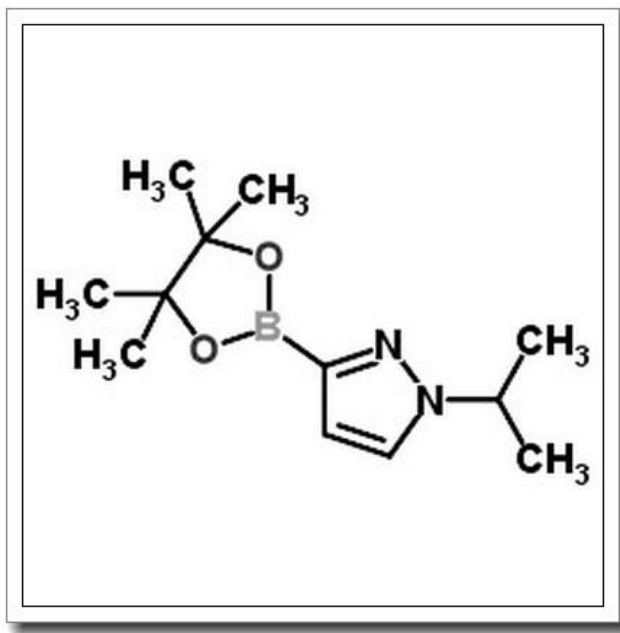


# 1-异丙基-4-吡唑硼酸频哪醇酯

*1-propan-2-yl-3-(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-propan-2-yl-3-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)pyrazole
中文名称	1-异丙基-4-吡唑硼酸频哪醇酯
CAS 号	1071496-88-2
分子式	C <sub>12</sub> H <sub>21</sub> BN <sub>2</sub> O <sub>2</sub>
分子量	236.118
纯度	>96%

## 产品说明

### 1. 产品概述与化学特性

1-异丙基-4-吡唑硼酸频哪醇酯 (CAS 号: 1071496-88-2) 是一种含硼有机化合物, 分子式为  $C_{12}H_{21}BN_2O_2$ , 分子量为 236.118。该化合物以吡唑环为核心结构, 通过硼酸频哪醇酯基团修饰, 具有较高的化学稳定性和反应活性。其纯度大于 96%, 外观通常为白色至类白色固体或粉末, 可溶于常见有机溶剂如二甲基亚砷 (DMSO)、甲醇和乙腈, 但在水中溶解度较低。

### 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。其硼酸频哪醇酯基团能够与卤代芳烃或烯烃高效反应, 构建碳-碳键, 因此在药物化学和材料科学领域具有重要价值。此外, 吡唑环结构赋予其潜在的生物活性, 可用于靶向药物分子的设计与合成。

### 3. 主要应用领域与具体用途

1-异丙基-4-吡唑硼酸频哪醇酯广泛应用于医药研发、农药合成及功能材料制备。在医药领域, 它常用于构建抗肿瘤、抗炎或抗感染药物的核心骨架; 在农药化学中, 可作为修饰基团引入杀虫剂或杀菌剂分子。此外, 该化合物还可用于液晶材料、有机发光二极管 (OLED) 等高性能材料的合成。

### 4. 储存条件与使用建议

建议将本品密封保存于 2-8°C 的干燥环境中, 避免光照和潮湿。长期储存需充入惰性气体 (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, 避免接触强氧化剂或酸碱物质。溶解时建议使用无水溶剂, 并确保反应体系无水无氧。

### 5. 质量控制与安全信息

本产品通过高效液相色谱 (HPLC) 和核磁共振 (NMR) 严格质量控制, 确保纯度符合标准。安全方面, 该化合物可能对眼睛、皮肤和呼吸系统产生刺激, 操作时应佩

戴防护手套、护目镜及防尘口罩。若不慎接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物需按危险化学品规范处置。

(全文共计 436 字)