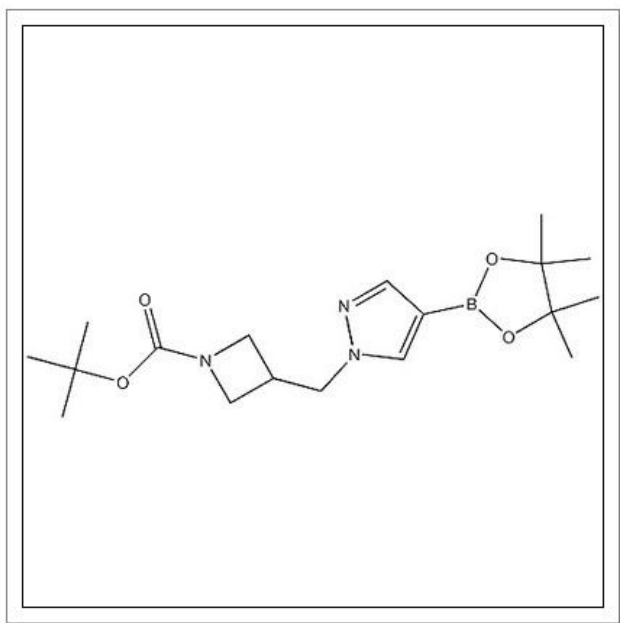


3-(4-硼酸频哪醇酯基吡唑)甲基氮杂环丁烷-1-碳酸叔丁酯

tert-butyl 3-{{[4-(tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-1H-pyrazol-1-yl]methyl}azetidine-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-butyl 3-{{[4-(tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-1H-pyrazol-1-yl]methyl}azetidine-1-carboxylate
中文名称	3-(4-硼酸频哪醇酯基吡唑)甲基氮杂环丁烷-1-碳酸叔丁酯
CAS 号	877399-31-0
分子式	C18H30BN3O4
分子量	363.2595
纯度	>96%

产品说明

3-(4-硼酸频哪醇酯基吡唑)甲基氮杂环丁烷-1-碳酸叔丁酯 (CAS 号: 877399-31-0) 是一种含硼杂环化合物, 分子式为 $C_{18}H_{30}BN_3O_4$, 分子量为 363.2595。该化合物以白色至类白色固体形式存在, 纯度超过 96%, 具有稳定的硼酸频哪醇酯结构, 适用于多种有机合成反应。其分子结构中的氮杂环丁烷和吡唑基团赋予其良好的反应活性, 尤其在过渡金属催化反应中表现优异。

1. 产品概述与化学特性

该化合物属于硼酸酯类衍生物, 兼具叔丁氧羰基 (Boc) 保护基团和硼酸频哪醇酯官能团。其化学稳定性较高, 在常温下不易分解, 但需避免强酸、强碱或氧化剂环境。硼酸频哪醇酯结构使其在 Suzuki-Miyaura 偶联反应中可作为关键中间体, 而 Boc 基团则便于后续脱保护引入氨基。

2. 生物化学功能与重要性

作为硼酸酯类试剂, 该化合物在药物化学和材料科学中具有重要价值。其硼原子可通过偶联反应与芳基或烯基卤化物结合, 广泛应用于靶向药物分子砌块的合成。氮杂环丁烷结构常见于生物活性分子中, 能够增强化合物的代谢稳定性和靶标亲和力。

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, 具体包括:

- 作为 Suzuki 偶联反应的关键中间体, 用于构建 C-C 键;
- 合成含氮杂环丁烷结构的抗癌或抗感染药物候选分子;
- 在 PROTAC 分子设计中作为连接子或功能片段。

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。使用前需恢复至室温并避免接触水分, 以防硼酸酯水解。反应应在无水无氧条件下进行, 推荐使用 Schlenk 技术或手套箱操作。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度>96%，并提供 COA 分析报告。使用时需佩戴防护手套和护目镜，避免吸入或皮肤接触。其安全数据（SDS）显示对眼睛和呼吸道有刺激性，操作应在通风橱中进行。废弃物需按危险化学品规范处置。