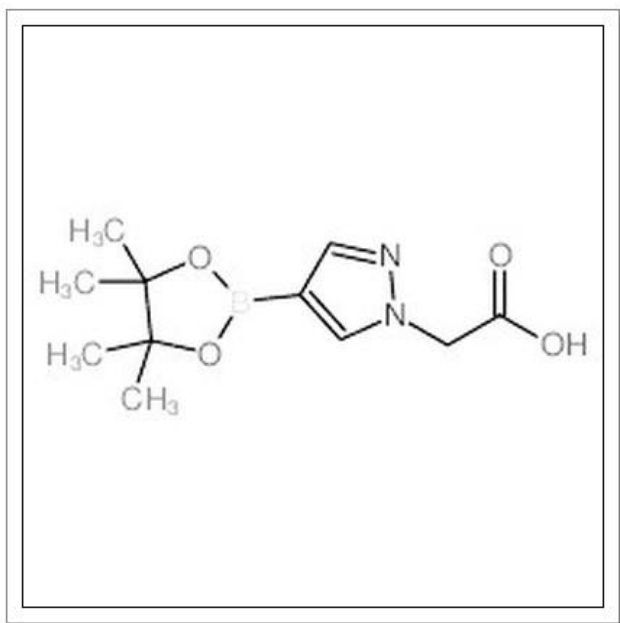


4-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二噁硼烷-2-基)-1H-吡唑-1-乙酸

4-(4,4,5,5-Tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-1H-pyrazole-1-acetic acid



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-pyrazole-1-acetic acid
中文名称	4-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二噁硼烷-2-基)-1H-吡唑-1-乙酸
CAS 号	1083326-41-3
分子式	C ₁₁ H ₁₇ BN ₂ O ₄
分子量	252.075
纯度	>96%

产品说明

4-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二噁硼烷-2-基)-1H-吡唑-1-乙酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为含硼杂环化合物，化学名称为 4-(4,4,5,5-Tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-1H-pyrazole-1-acetic acid, CAS 号为 1083326-41-3, 分子式 C₁₁H₁₇BN₂O₄, 分子量 252.075。其结构包含吡唑环与二噁硼烷基团，通过乙酸基团实现功能化修饰。外观通常为白色至类白色结晶粉末，纯度 ≥96% (HPLC 测定)，易溶于二甲基亚砜 (DMSO) 和部分极性有机溶剂，水溶性较低。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为硼酸酯类衍生物，具有以下特性：其一，硼原子空轨道使其可作为 Suzuki-Miyaura 偶联反应的关键中间体，用于构建碳-碳键；其二，吡唑环结构赋予其潜在的生物活性，在药物研发中常用于激酶抑制剂或抗炎分子的合成；其三，乙酸侧链提供了进一步衍生化的活性位点，扩展了其在材料科学中的应用潜力。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发领域，本品常用于以下场景：作为小分子靶向药物的硼酸前体，用于前列腺癌治疗药物类似物的合成；在有机发光材料 (OLED) 开发中，作为电子传输层的构建单元；在化学生物学研究中，其硼酸基团可用于糖类或蛋白质的标记与探针设计。

4. 储存条件与使用建议

建议储存于 -20°C、惰性气体 (如氩气) 保护的干燥环境中，避免光照与潮湿。开封后需立即使用或充氮密封保存。实验操作应在通风橱中进行，溶解时优先选用无水 DMSO，配制成母液后建议分装冻存，避免反复冻融。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC、NMR 及质谱三重验证，确保批次间一致性。安全数据表明：其急性毒性 (LD₅₀) 为大鼠经口 >500 mg/kg，但仍需佩戴防护手套与护目镜操作。若接触

皮肤，应立即用大量清水冲洗 15 分钟。废弃物处理需符合当地危险化学品管理条例，建议通过专业机构进行焚化处置。

注：以上信息基于现有研究数据，具体应用需结合实验条件优化。更多技术参数可索取 COA（分析证书）。