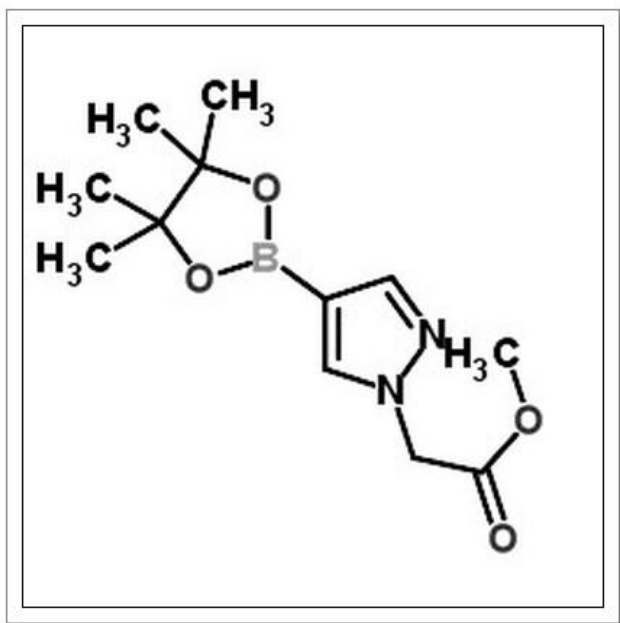


4-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二噁硼烷-2-基)-1H-吡唑-1-乙酸甲酯

methyl 2-[4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)pyrazol-1-yl]acetate



产品基本信息

属性	值
化学名称	methyl 2-[4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)pyrazol-1-yl]acetate
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-乙酸甲酯
CAS 号	959585-44-5
分子式	C12H19BN2O4
分子量	266.101
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-乙酸甲酯产品说明书

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 methyl 2-[4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)pyrazol-1-yl]acetate, CAS 号 959585-44-5, 分子式 C₁₂H₁₉BN₂O₄, 分子量 266.101。其结构同时包含吡唑环与二噁硼烷基团，常温下呈白色至类白色结晶粉末，纯度>96% (HPLC 测定)。该化合物在有机溶剂如 DMSO、甲醇中具有良好溶解性，但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

作为硼酸酯类衍生物，该化合物可通过 Suzuki-Miyaura 偶联反应作为关键中间体参与碳-碳键形成。吡唑环结构赋予其潜在的生物活性，在药物化学中常用于构建激酶抑制剂或抗炎药物的核心骨架。二噁硼烷基团则显著提升其稳定性，便于储存与后续衍生化反应。

3. 主要应用领域与具体用途

- 3.1 医药研发：用于合成靶向抗癌药物（如 PARP 抑制剂）及抗代谢类化合物。
- 3.2 材料科学：作为有机发光二极管（OLED）材料的前驱体。
- 3.3 化学合成：在过渡金属催化反应中作为硼酸酯供体，适用于构建复杂杂环体系。

4. 储存条件与使用建议

- 4.1 储存条件：需避光密封保存于-20° C 惰性气体（如氩气）环境中，湿度控制在 40%以下。
- 4.2 复溶建议：使用前需恢复至室温，推荐以无水 DMSO 配制母液（10-50 mM），避免反复冻融。
- 4.3 操作防护：应在通风橱中操作，佩戴防尘口罩及丁腈手套。

5. 质量控制与安全信息

- 5.1 质检标准：通过 HPLC、NMR 及质谱进行批次验证，残留溶剂符合 ICH Q3C 标

准。

5.2 安全数据: 属于刺激性化学品 (GHS 分类: H315-H319-H335), 避免吸入或接触皮肤。

5.3 应急处置: 眼睛接触时立即用生理盐水冲洗 15 分钟, 皮肤沾染需用大量肥皂水清洗。

本产品仅限科研用途, 不适用于临床或食品领域。建议使用者具备有机合成实验经验, 并严格遵守实验室安全规程。