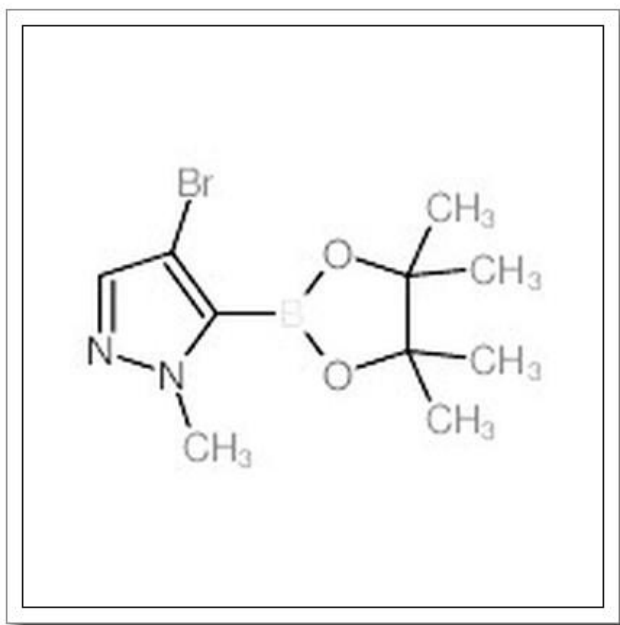


4-溴-1-甲基-5-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二噁硼烷-2-基)-1H-吡唑

4-Bromo-1-methyl-5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-1H-pyrazole



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-Bromo-1-methyl-5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-1H-pyrazole
中文名称	4-溴-1-甲基-5-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二噁硼烷-2-基)-1H-吡唑
CAS 号	942070-88-4
分子式	C ₁₀ H ₁₆ BBrN ₂ O ₂
分子量	286.961
纯度	>96%

产品说明

4-溴-1-甲基-5-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二噁硼烷-2-基)-1H-吡唑是一种重要的有机硼化合物，化学式为 $C_{10}H_{16}BBrN_2O_2$ ，分子量为 286.961，CAS 号为 942070-88-4。该化合物为白色至类白色结晶粉末，纯度通常高于 96%，具有良好的化学稳定性和反应活性。其结构中同时含有吡唑环和硼酸酯基团，使其在有机合成中表现出独特的反应特性。

1. 产品概述与化学特性

该化合物属于硼酸酯类衍生物，其分子中的硼原子与二噁硼烷环形成稳定的配位结构，而 4-溴取代基和 1-甲基吡唑环则赋予其良好的亲电性和空间位阻效应。该物质易溶于常见有机溶剂如二氯甲烷、THF 和乙醚，但在水中溶解度较低。其熔点和沸点数据需参考具体实验条件，建议在惰性气体保护下进行高温操作。

2. 生物化学功能与重要性

作为 Suzuki-Miyaura 偶联反应的关键中间体，该化合物能够高效参与碳-碳键形成反应。吡唑环结构使其在药物化学中具有特殊价值，常见于激酶抑制剂和抗炎药物的合成。硼酸酯基团则提供了与卤代烃交叉偶联的能力，是构建复杂有机分子的重要工具。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要应用于医药研发和材料科学领域。在药物发现中，常用于构建含吡唑结构的候选化合物库；在材料化学中，可作为有机发光二极管（OLED）材料的合成前体。具体用途包括但不限于：过渡金属催化反应的底物、生物活性分子的结构修饰、以及功能高分子材料的单体合成。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 、惰性气体（如氩气或氮气）保护下避光保存，开封后需重新充入保护气体密封。使用时应避免接触水分和强氧化剂，操作环境需保持干燥。推荐在通风良好的化学通风橱中称量和使用，避免直接吸入粉尘或接触皮肤。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC、NMR 和质谱进行严格质量控制，确保批次间一致性。安全数据表明该化合物可能对眼睛和皮肤有刺激性，操作时应佩戴防护眼镜和手套。如发生意外接触，需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地危险化学品处置法规，建议通过专业化学废弃物回收机构处理。