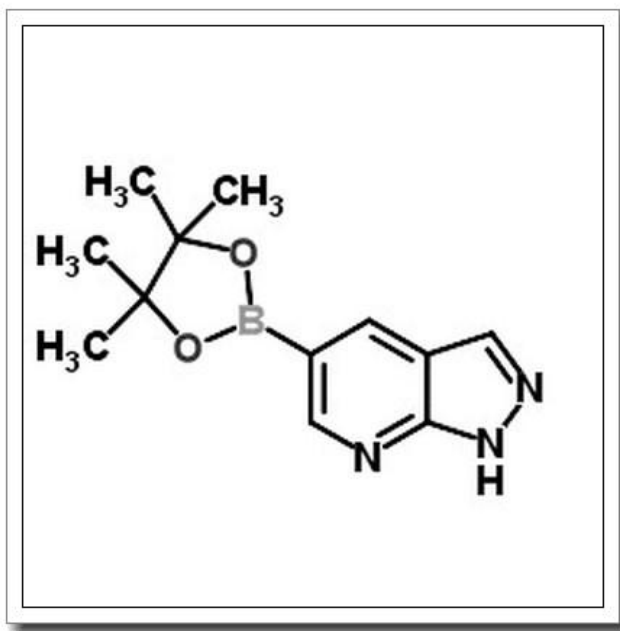


# 5-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼烷)-1H-吡唑并[3,4-b]吡啶

*1H-Pyrazolo[3,4-b]Pyridine-5-Boronic Acid Pinacol Ester*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	1H-Pyrazolo[3,4-b]Pyridine-5-Boronic Acid Pinacol Ester
中文名称	5-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼烷)-1H-吡唑并[3,4-b]吡啶
CAS 号	1093819-50-1
分子式	C <sub>12</sub> H <sub>16</sub> BN <sub>3</sub> O <sub>2</sub>
分子量	245.085
纯度	>96%

## 产品说明

### 1. 产品概述与化学特性

5-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼烷)-1H-吡唑并[3,4-b]吡啶 (CAS 号: 1093819-50-1) 是一种有机硼酸酯化合物, 分子式为  $C_{12}H_{16}BN_3O_2$ , 分子量为 245.085。该化合物以吡唑并吡啶为母核, 在 5 位引入硼酸频哪醇酯基团, 具有较高的化学稳定性和反应活性。其纯度通常大于 96%, 外观为白色至类白色固体, 可溶于常见有机溶剂如二甲基亚砜 (DMSO)、四氢呋喃 (THF) 等。

### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为硼酸酯衍生物, 在 Suzuki-Miyaura 偶联反应中表现出优异的反应性能, 能够与卤代芳烃或芳基磺酸酯高效偶联, 构建碳-碳键。其吡唑并吡啶骨架在药物化学中具有重要价值, 常见于激酶抑制剂和抗肿瘤药物的设计。此外, 硼酸酯基团的引入使其成为合成复杂杂环化合物的关键中间体。

### 3. 主要应用领域与具体用途

该产品广泛应用于医药研发、材料科学和有机合成领域。在医药领域, 它可用于合成靶向抗癌药物和抗炎药物的中间体; 在材料科学中, 可用于制备有机发光二极管 (OLED) 的功能材料; 在有机合成中, 常用于构建含氮杂环化合物或作为多组分反应的底物。

### 4. 储存条件与使用建议

建议在  $-20^{\circ}C$  下避光干燥储存, 长期保存需充入惰性气体 (如氮气或氩气)。使用时需在干燥惰性气氛 (如手套箱) 中操作, 避免接触水分或强氧化剂。溶解时建议使用无水溶剂, 并现配现用以保证反应活性。

### 5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和 NMR 严格检测, 确保纯度大于 96%。使用时需穿戴防护手套、护目镜和实验服, 避免吸入粉尘或接触皮肤。若不慎接触, 应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。

(注: 以上信息基于实验室环境下的典型数据, 具体应用需根据实际需求进一步验证。)