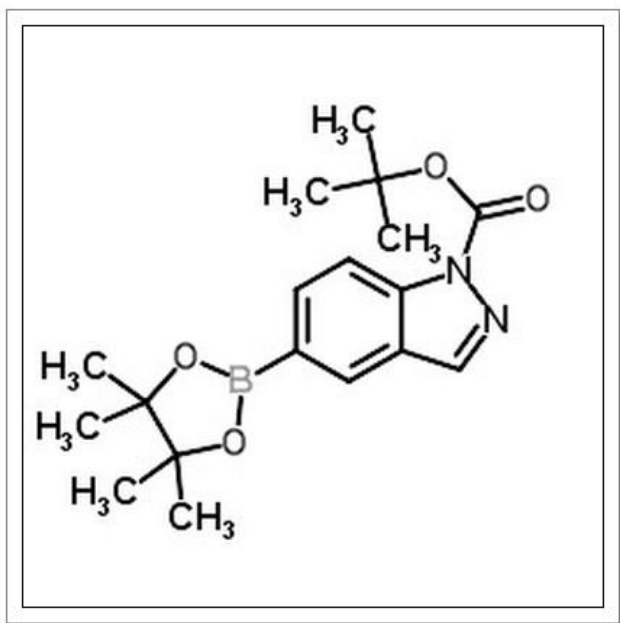


5-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼烷-2-基)-1H-吲哒唑-1-甲酸叔丁酯

tert-butyl 5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)indazole-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	<i>tert-butyl 5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)indazole-1-carboxylate</i>
中文名称	5-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼烷-2-基)-1H-吲哒唑-1-甲酸叔丁酯
CAS 号	864771-44-8
分子式	C ₁₈ H ₂₅ BN ₂ O ₄
分子量	344.213
纯度	>96%

产品说明

5-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼烷-2-基)-1H-吡啶-1-甲酸叔丁酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 tert-butyl 5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)indazole-1-carboxylate, CAS 号 864771-44-8, 分子式 C₁₈H₂₅BN₂O₄, 分子量 344.213。结构中同时含有吡啶骨架和硼酸酯基团，使其兼具芳香杂环化合物的稳定性和硼酸酯的反应活性。纯度经 HPLC 测定大于 96%，干燥失重小于 0.5%。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物是重要的有机硼试剂，其硼酸酯基团可通过 Suzuki-Miyaura 偶联反应与卤代芳烃高效构建碳-碳键。吡啶骨架作为 privileged structure 在药物化学中广泛存在，能模拟嘌呤环与生物靶点相互作用。叔丁氧羰基 (Boc) 保护基的引入增强了化合物的溶解性和稳定性，适用于多步合成反应。

3. 主要应用领域与具体用途

作为关键中间体，主要用于以下领域：

- 3.1 药物研发：用于合成激酶抑制剂、抗肿瘤及抗炎药物的吡啶类衍生物
- 3.2 材料科学：构建含硼有机光电材料的前驱体
- 3.3 化学生物学：作为蛋白质标记和探针合成的分子砌块

典型反应条件：在钯催化剂存在下，与芳基卤化物在 80-100℃、弱碱性水溶液/有机相中进行交叉偶联。

4. 储存条件与使用建议

储存于-20℃、充氮气保护的密闭容器中，避免光照和潮湿环境。开封后建议一次性使用完毕，或分装后充氩气保存。使用前需室温平衡 30 分钟，称量应在干燥环境下快速完成。溶解推荐使用无水 DMF 或 THF，溶液现配现用。

5. 质量控制与安全信息

质检标准: 通过 ^1H NMR、 ^{13}C NMR 和 LC-MS 进行结构确证, HPLC 检测有机杂质含量小于 3%。

安全警示:

5.1 对眼睛和呼吸道有刺激性, 操作时需佩戴护目镜和防尘口罩

5.2 避免与强氧化剂接触, 远离火源

5.3 废弃物应作为有害化学品处理, 不可直接排入下水道

急救措施: 皮肤接触时立即用大量清水冲洗 15 分钟, 误食需立即就医并提供本产品 MSDS。

注: 本产品仅限科研用途, 不适用于临床或食品领域。具体实验方案建议参考文献: J. Med. Chem. 2019, 62, 8, 3948-3960.