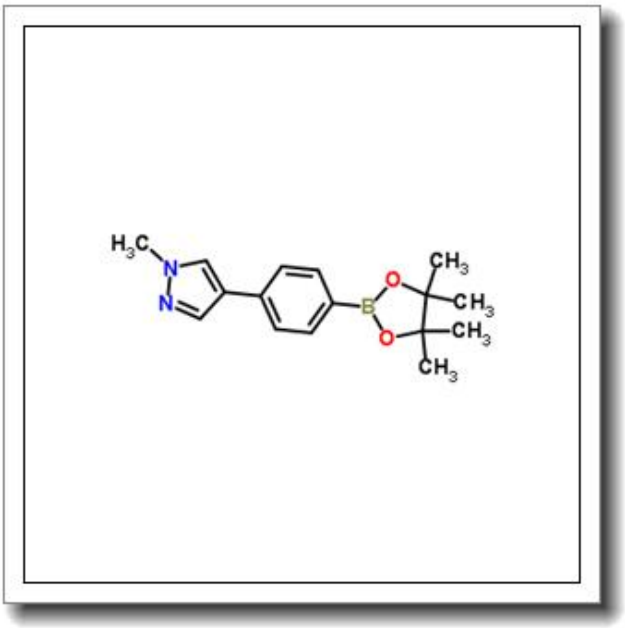
1-Methyl-4-[4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)phenyl]-1H-pyrazole

1-Methyl-4-[4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)phenyl]-1H-pyrazole



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-Methyl-4-[4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)phenyl]-1H-pyrazole
中文名称	1-Methyl-4-[4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)phenyl]-1H-pyrazole
CAS 号	1607838-14-1
分子式	C16H21BN2O2
分子量	284.161
纯度	≧96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本产品为1-甲基-4-[4-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼杂环戊烷-2-基)苯基]-1H-吡唑（CAS号：1607838-14-1），是一种含硼有机化合物，分子式为C16H21BN2O2，分子量284.161。其结构包含吡唑环与苯硼酸频哪醇酯基团，纯度≥96%，常温下呈白色至类白色结晶或粉末状。该化合物在有机溶剂如二甲基亚砜（DMSO）、甲醇中具有良好的溶解性，但对湿度敏感，需避免与水接触。

2. 生物化学功能与重要性

作为硼酸酯类衍生物，该化合物在Suzuki-Miyaura交叉偶联反应中表现出高效的硼酸基供体特性，能够与卤代芳烃或烯烃形成碳-碳键。其吡唑环结构赋予分子一定的刚性及配位能力，可用于金属催化反应的配体设计。在药物化学领域，此类结构常作为中间体用于构建靶向蛋白激酶抑制剂的杂环骨架。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要应用于以下领域：

（1）医药研发：作为关键中间体用于合成抗肿瘤、抗炎等小分子药物，尤其是蛋白激酶抑制剂类候选化合物。

（2）材料科学：参与构建有机光电材料（如OLED）的共轭体系，或作为功能化聚合物的单体。

（3）化学合成：用于多步有机合成中的硼化反应，或作为保护基团在复杂分子修饰中发挥作用。

4. 储存条件与使用建议

建议在惰性气体（如氩气或氮气）保护下密封保存，储存温度-20°C至4°C，避免光照与潮湿环境。开封后需立即使用或充惰性气体后重新密封。使用前需平衡至室温以防止结露，称量应在干燥环境下进行。溶解时优先选用无水溶剂，并建议通过氩气鼓泡除氧以增强稳定性。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 验证纯度≥96%，残留溶剂符合 ICH 标准。安全数据表明其可能导致眼睛和皮肤刺激，操作时应佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩。若意外接触，需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需遵循当地法规，避免直接排放至环境中。建议在通风橱中操作，远离火源及氧化剂。

（注：实际使用前请务必查阅最新版物质安全数据表（MSDS）并进行风险评估。）