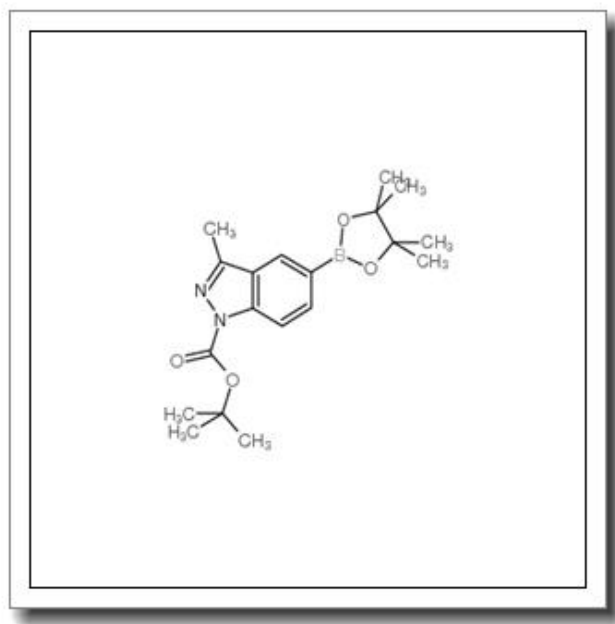


# 1-N-Boc-3-甲基吲唑-5-硼酸频那醇酯

*tert-butyl 3-methyl-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 3-methyl-5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)indazole-1-carboxylate</i>
中文名称	1-N-Boc-3-甲基吲唑-5-硼酸频那醇酯
CAS 号	864770-82-1
分子式	C <sub>19</sub> H <sub>27</sub> BN <sub>2</sub> O <sub>4</sub>
分子量	358.24
纯度	≥ 96%

## 产品说明

### 1. 产品概述与化学特性

1-N-Boc-3-甲基吡唑-5-硼酸频那醇酯 (CAS 号: 864770-82-1) 是一种重要的硼酸酯类化合物, 其分子式为  $C_{19}H_{27}BN_2O_4$ , 分子量为 358.24。该化合物以白色至类白色固体形式存在, 纯度通常不低于 96%。其结构中的硼酸频那醇酯基团和 Boc 保护基使其在有机合成中具有较高的反应活性, 尤其适用于 Suzuki-Miyaura 偶联反应。该化合物在常温下稳定, 但对湿气和光敏感, 需在惰性气氛下保存。

### 2. 生物化学功能与重要性

作为吡唑类衍生物, 该化合物在药物化学和材料科学中具有重要价值。吡唑骨架是许多生物活性分子的核心结构, 常见于激酶抑制剂和抗癌药物的设计中。硼酸频那醇酯基团使其成为构建复杂有机分子的关键中间体, 广泛应用于碳-碳键形成反应。此外, Boc 保护基的存在增强了化合物的稳定性, 便于后续脱保护官能化。

### 3. 主要应用领域与具体用途

该化合物主要用于医药研发和有机合成领域。在药物发现中, 它是构建吡唑类活性分子的重要前体, 可用于合成靶向肿瘤、炎症或中枢神经系统疾病的候选药物。在材料科学中, 可作为有机光电材料的合成砌块。具体用途包括: Suzuki 偶联反应中的硼酸试剂、杂环化合物的官能化修饰、以及多步合成中的关键中间体。

### 4. 储存条件与使用建议

建议在  $-20^{\circ}C$ 、惰性气体 (如氮气或氩气) 保护下避光保存, 长期储存需置于干燥器中。使用前应在惰性气氛下恢复至室温, 避免接触水分。溶解时推荐使用无水四氢呋喃或二甲基亚砜等惰性溶剂。操作时应佩戴防护手套和护目镜, 在通风良好的环境中进行。

### 5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测确认纯度  $\geq 96\%$ , 并提供详细的核磁共振 (NMR) 和质谱 (MS) 分析数据。安全信息显示, 该化合物可能对眼睛和皮肤有刺激性, 操作时应避免直接接触。如不慎接触, 应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应按照危险化

学品处理规范处置。建议在专业化学人员指导下使用，并严格遵守实验室安全规程。