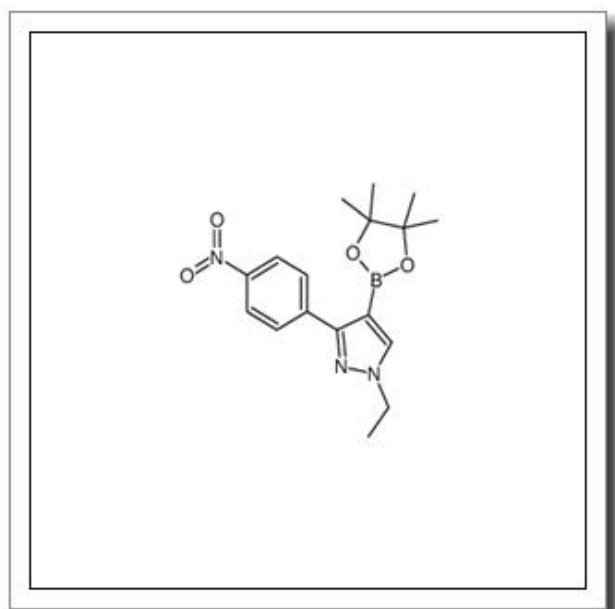


1-乙基-3-(4-硝基苯基)-4-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二噁硼烷-2-基)-1H-吡唑

1-Ethyl-3-(4-nitrophenyl)-4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborol an-2-yl)-1H-pyrazole



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-Ethyl-3-(4-nitrophenyl)-4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborol an-2-yl)-1H-pyrazole
中文名称	1-乙基-3-(4-硝基苯基)-4-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二噁硼烷-2-基)-1H-吡唑
CAS 号	942920-11-8
分子式	C ₁₇ H ₂₂ BN ₃ O ₄
分子量	343.185
纯度	≥ 96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

1-乙基-3-(4-硝基苯基)-4-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二噁硼烷-2-基)-1H-吡唑 (CAS 号: 942920-11-8) 是一种含硼有机化合物, 分子式为 C₁₇H₂₂BN₃O₄, 分子量为 343.185。该化合物结构中含有吡唑环、硝基苯基以及四甲基二噁硼烷基团, 兼具芳香性和硼酸酯特性, 使其在有机合成中表现出独特的反应活性。其纯度 ≥96%, 外观通常为白色至浅黄色结晶或粉末, 需避光保存以维持稳定性。

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 偶联反应中可作为关键中间体, 用于构建碳-碳键。其硝基苯基结构赋予其潜在的电子受体特性, 而硼酸酯基团则提供了与卤代烃或三氟甲磺酸酯的高效偶联能力。在药物化学和材料科学领域, 此类结构常用于合成靶向分子或功能材料的前体。

3. 主要应用领域与具体用途

- 药物研发: 作为中间体用于合成含吡唑结构的活性药物分子, 如激酶抑制剂或抗炎药物。
- 材料科学: 参与制备有机发光二极管 (OLED) 或液晶材料的共轭体系。
- 化学研究: 在过渡金属催化反应中作为硼酸酯供体, 拓展复杂分子的合成路径。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C 下避光干燥储存, 长期保存需充惰性气体 (如氮气) 保护。使用时需在惰性气氛 (如氩气) 下操作, 避免接触水分或强氧化剂。溶解性测试表明, 该化合物易溶于二甲基亚砷 (DMSO) 和四氢呋喃 (THF), 但在水中稳定性较差。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测确保纯度 ≥96%, 并提供核磁共振 (NMR) 和质谱 (MS) 数据以验证结构。安全信息提示:

- 避免吸入粉尘或接触皮肤, 操作时需佩戴防护手套和护目镜。

- 如意外接触，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，不可直接排放至环境中。

以上信息基于现有研究数据，具体应用需结合实验条件进一步优化。