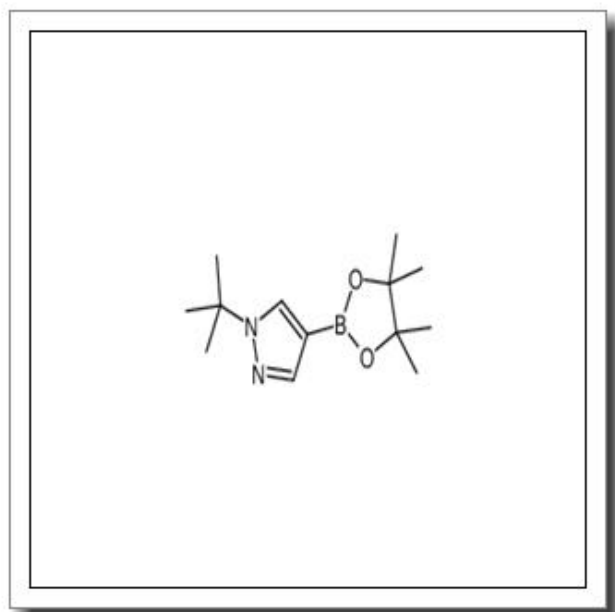


1-叔丁基吡唑-4-硼酸频那醇酯

1-(tert-Butyl)-4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-1H-pyrazole



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-(tert-Butyl)-4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-1H-pyrazole
中文名称	1-叔丁基吡唑-4-硼酸频那醇酯
CAS 号	1256359-15-5
分子式	C ₁₃ H ₂₃ BN ₂ O ₂
分子量	250.145
纯度	≥ 96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

1-叔丁基吡唑-4-硼酸频那醇酯 (CAS 号: 1256359-15-5) 是一种有机硼化合物, 分子式为 $C_{13}H_{23}BN_2O_2$, 分子量为 250.145。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吡唑环使其在有机合成中具有较高的反应活性, 尤其是作为 Suzuki-Miyaura 偶联反应的关键中间体。该化合物在常温下稳定, 但需避免与强氧化剂接触。

2. 生物化学功能与重要性

1-叔丁基吡唑-4-硼酸频那醇酯在生物化学和药物化学领域具有重要价值。其硼酸酯基团能够与卤代芳烃或烯烃发生高效的交叉偶联反应, 广泛应用于构建碳-碳键。这一特性使其成为合成复杂有机分子 (如药物活性成分和功能材料) 的重要工具。此外, 吡唑环结构在药物设计中常见, 因其具有潜在的生物活性和药效团特性。

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。具体用途包括:

- 作为 Suzuki-Miyaura 偶联反应的硼酸酯试剂, 用于合成芳基或杂芳基化合物。
- 在药物化学中用于构建含吡唑环的候选药物分子, 如激酶抑制剂或抗炎药物。
- 在材料科学中用于制备功能化聚合物或光电材料。

4. 储存条件与使用建议

为确保产品稳定性, 建议在 $-20^{\circ}C$ 下避光干燥储存, 并置于惰性气体 (如氮气) 环境中。使用时需在干燥条件下操作, 避免接触水分或空气。开封后应尽快使用, 剩余部分需密封保存。实验操作时建议佩戴防护手套和护目镜, 并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 和 NMR 严格质量控制, 纯度 $\geq 96\%$ 。安全信息如下:

- 避免吸入、食入或皮肤接触, 可能对眼睛和呼吸道有刺激性。

- 如接触皮肤或眼睛，立即用大量清水冲洗并就医。
- 废弃处理需遵循当地法规，不可直接排放至环境中。
- 安全数据表（SDS）可应要求提供，使用前请仔细阅读。