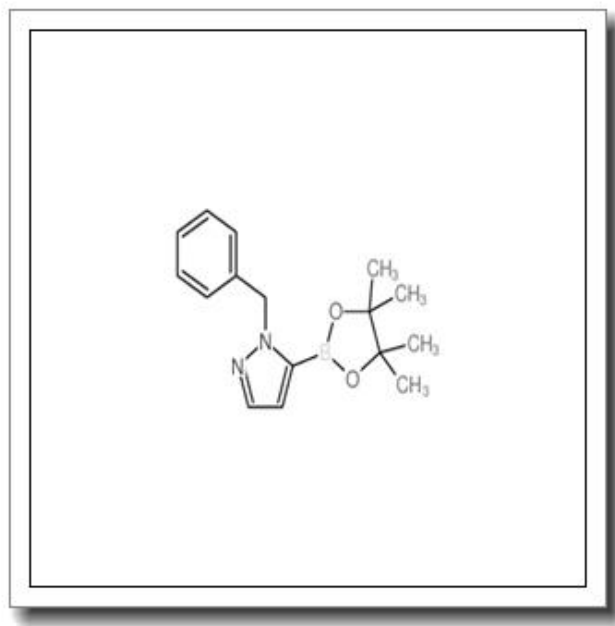


1-苄基-1H-吡唑-5-硼酸频哪醇酯

1-benzyl-5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)pyrazole



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-benzyl-5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)pyrazole
中文名称	1-苄基-1H-吡唑-5-硼酸频哪醇酯
CAS 号	1362243-50-2
分子式	C ₁₆ H ₂₁ BN ₂ O ₂
分子量	284.161
纯度	≥96%

产品说明

1-苄基-1H-吡唑-5-硼酸频哪醇酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 1-benzyl-5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)pyrazole, 是一种含硼有机化合物, CAS 号为 1362243-50-2。其分子式为 C₁₆H₂₁BN₂O₂, 分子量为 284.161, 纯度 ≥96%。该化合物为白色至类白色结晶粉末, 具有硼酸频哪醇酯的典型稳定性, 可在惰性气氛下长期保存。其结构中的吡唑环与苄基官能团赋予其良好的反应活性, 尤其适用于 Suzuki-Miyaura 偶联反应。

2. 生物化学功能与重要性

作为硼酸酯类衍生物, 该化合物在过渡金属催化反应中表现出优异的偶联效率, 是构建碳-碳键的关键中间体。其分子中的硼原子可通过配位作用与钯催化剂形成活性中间体, 广泛应用于药物分子骨架的合成。在生物活性分子研发中, 吡唑硼酸酯类化合物因其结构可调性和代谢稳定性, 常被用作激酶抑制剂的合成砌块。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药研发和有机合成领域。在药物化学中, 可用于合成抗肿瘤、抗炎及中枢神经系统药物候选分子。在材料科学中, 可作为有机发光二极管 (OLED) 材料的合成前体。具体应用包括但不限于: Suzuki 偶联反应中作为芳基化试剂、杂环化合物的结构修饰、以及高通量筛选中的分子库构建。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C、惰性气体 (如氩气或氮气) 保护下避光保存, 开封后需充惰性气体密封。使用前需在干燥环境中恢复至室温以避免吸湿。反应操作应在无水无氧条件下进行, 推荐使用 Schlenk 技术或手套箱。溶解性测试表明, 本品易溶于 THF、DMSO 等极性有机溶剂, 微溶于醇类。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 ≥96%, 重金属含量 <10 ppm。安全数据表明, 该化合物对眼睛和皮肤有刺激性, 操作时应佩戴防护手套及护目镜。若不慎接触, 需立即用大

量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地有机硼化合物处置法规，禁止直接排放至环境中。

（注：本说明基于现有研究数据编制，具体应用需结合实验条件优化。更多技术参数请索取 COA 报告。）