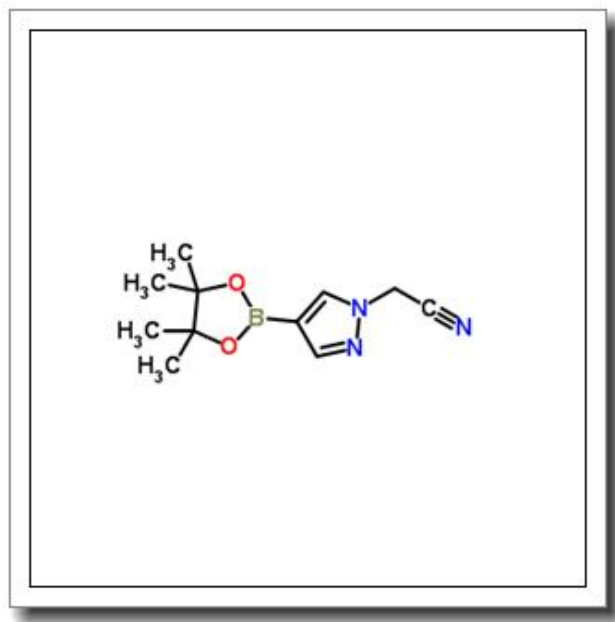


2-[4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)pyrazol-1-yl]acetonitrile

2-[4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)pyrazol-1-yl]acetonitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-[4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)pyrazol-1-yl]acetonitrile
中文名称	2-[4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)pyrazol-1-yl]acetonitrile
CAS 号	1093307-35-7
分子式	C ₁₁ H ₁₆ BN ₃ O ₂
分子量	233.075
纯度	≥96%

产品说明

2-[4-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼杂环戊烷-2-基)吡唑-1-基]乙腈产品说明

1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 2-[4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)pyrazol-1-yl]acetonitrile，分子式 C₁₁H₁₆BN₃O₂，分子量 233.075，CAS 号 1093307-35-7。其结构中包含吡唑环与二氧硼杂环戊烷基团，通过乙腈连接，形成稳定的硼酸酯衍生物。纯度 ≥96%，可通过 HPLC 和 NMR 验证。该化合物在常温下稳定，易溶于有机溶剂如 DMSO、甲醇和乙腈，微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为硼酸酯类化合物，该产品在 Suzuki-Miyaura 交叉偶联反应中表现出高反应活性，可作为关键中间体用于构建碳-碳键。其吡唑基团赋予分子良好的配位能力，而硼酸酯部分在温和条件下可水解为硼酸，进一步参与生物正交反应。在药物化学中，此类结构常用于靶向蛋白激酶的抑制剂设计，尤其在抗癌和抗炎药物研发中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要应用于医药研发和有机合成领域。具体用途包括：作为小分子抑制剂的核心骨架，用于激酶抑制剂（如 EGFR、ALK 等）的结构优化；在 PET 显影剂合成中作为硼酸前体；此外，还可用于材料科学中功能化聚合物的制备。其高纯度特性使其特别适合高通量筛选和结构-活性关系（SAR）研究。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C、干燥避光条件下长期储存，短期使用可置于 4° C 环境。开封后需充惰性气体（如氮气）保护以避免吸湿。使用时应在惰性气氛（氩气/氮气）下操作，溶解推荐使用无水 DMSO。避免与强氧化剂或酸碱接触，以防硼酸酯键断裂。

5. 质量控制与安全信息

本产品经严格质控，包括 HPLC 纯度检测、质谱和核磁共振谱验证。安全数据表

明, 其 LD50 (大鼠口服) >500 mg/kg, 但仍需遵守实验室安全规范: 操作时佩戴防护手套和护目镜, 避免吸入粉尘或接触皮肤。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处理法规处置。

注: 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验证。