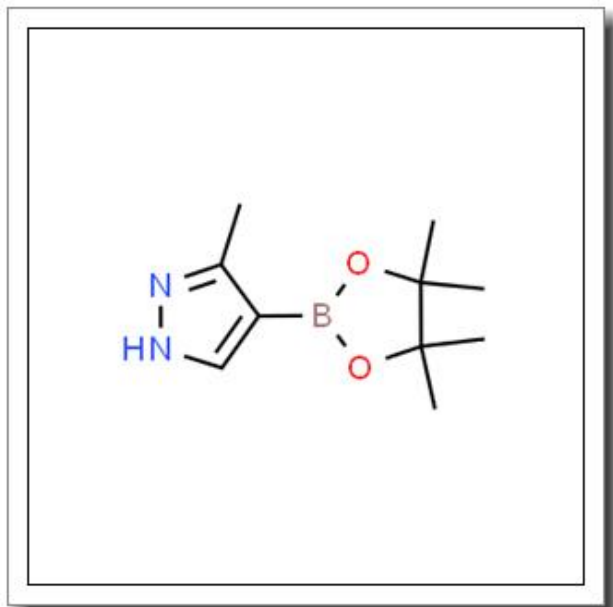


# 5-甲基-4-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼杂环戊烷-2-基)-1H-吡唑

*5-Methyl-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	5-Methyl-4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-1H-pyrazole
中文名称	5-甲基-4-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼杂环戊烷-2-基)-1H-吡唑
CAS 号	1430754-36-1
分子式	C <sub>10</sub> H <sub>17</sub> BN <sub>2</sub> O <sub>2</sub>
分子量	208.06518
纯度	≥96%

## 产品说明

### 5-甲基-4-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼杂环戊烷-2-基)-1H-吡唑产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

本产品为含硼杂环化合物，化学名称为 5-甲基-4-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼杂环戊烷-2-基)-1H-吡唑，CAS 号为 1430754-36-1。其分子式为  $C_{10}H_{17}BN_2O_2$ ，分子量为 208.06518，纯度  $\geq 96\%$ 。该化合物为白色至类白色结晶粉末，具有硼酸酯基团与吡唑环的协同结构，在有机溶剂如二甲基亚砜（DMSO）、甲醇中具有良好溶解性，但在水中溶解度较低。

#### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为硼酸酯类衍生物，其硼原子空轨道特性使其成为 Suzuki-Miyaura 偶联反应的关键中间体。吡唑环的氮原子配位能力可增强金属催化活性，在构建碳-碳键的交叉偶联反应中表现出高反应效率。其结构中的硼酸酯基团在生理条件下可水解为活性硼酸形式，适用于靶向蛋白激酶的抑制剂开发。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发领域，本品常用于小分子靶向药物的合成，特别是用于蛋白激酶抑制剂（如 EGFR、ALK 抑制剂）的硼化修饰。在材料科学中，可作为有机发光二极管（OLED）材料的硼掺杂前体。实验室应用中，主要用于以下场景：1) 过渡金属催化反应的配体；2) 硼酸类探针分子的合成；3) PET 显影剂的放射性标记前体。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议在惰性气体（如氩气）保护下密封保存，长期储存温度应控制在  $-20^{\circ}\text{C}$ 。开封后需在干燥器中保存，避免接触湿气。使用时应佩戴防护手套、护目镜，在通风橱中操作。溶解时建议先用少量 DMSO 预溶，再稀释至工作浓度。反应体系中需严格除氧，建议配合钯催化剂（如  $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ ）使用。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC、NMR 和质谱进行批次质量控制，确保硼含量  $\geq 11.5\%$ （理论值

11.8%)。安全数据表明,该化合物对眼睛和皮肤有刺激性(GHS分类:Eye Irrit. 2),操作时需避免吸入粉尘。如接触皮肤,应立即用大量清水冲洗。废弃物处理需遵守危险化学品处置规范,建议通过专业化学废弃物回收公司处理。