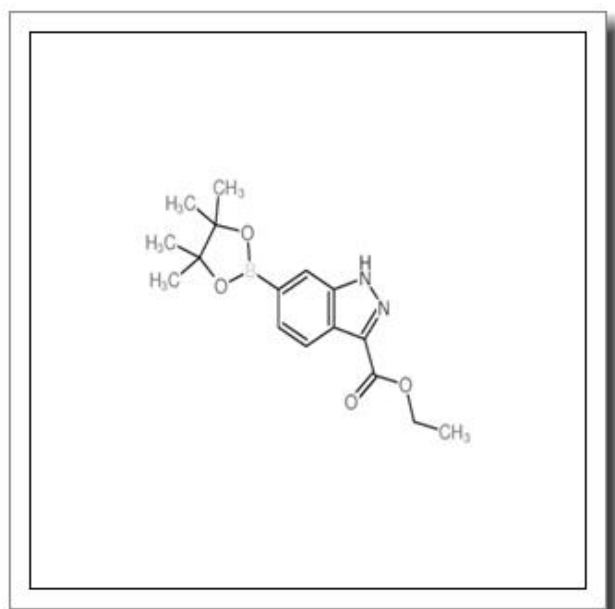


6-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼烷)-1H-吲唑-3-羧酸乙酯

Ethyl 6-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-1H-indazole-3-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Ethyl 6-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-1H-indazole-3-carboxylate
中文名称	6-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼烷)-1H-吲唑-3-羧酸乙酯
CAS 号	947191-20-0
分子式	C ₁₆ H ₂₁ BN ₂ O ₄
分子量	316.16
纯度	≥96%

产品说明

6-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼烷)-1H-吡唑-3-羧酸乙酯 (CAS 号: 947191-20-0) 是一种重要的有机硼酸酯类化合物, 分子式为 $C_{16}H_{21}BN_2O_4$, 分子量为 316.16。该化合物为白色至类白色结晶粉末, 纯度通常不低于 96%, 具有良好的化学稳定性和反应活性。其结构中包含吡唑环和硼酸酯基团, 使其在有机合成和药物化学中具有广泛的应用价值。

1. 产品概述与化学特性

该化合物属于硼酸酯类衍生物, 其分子中的硼酸酯基团 (4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼烷) 可作为重要的合成中间体, 参与 Suzuki-Miyaura 偶联反应等交叉偶联反应。吡唑环结构赋予其潜在的生物活性, 使其在药物研发中备受关注。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

作为硼酸酯类化合物, 其在生物医药领域具有重要价值, 可用于构建复杂分子骨架, 尤其是含吡唑结构的药物分子。硼酸酯基团在靶向药物设计和蛋白激酶抑制剂开发中具有独特优势, 常用于抗癌、抗炎等药物的合成。

3. 主要应用领域与具体用途

该化合物主要应用于医药研发和有机合成领域, 具体用途包括:

- 作为关键中间体用于 Suzuki 偶联反应, 构建 C-C 键;
- 用于合成含吡唑结构的药物候选分子, 如激酶抑制剂;
- 在材料科学中用于制备功能化有机硼化合物。

4. 储存条件与使用建议

建议在 2-8°C、干燥、避光条件下储存, 长期保存需置于惰性气体 (如氮气) 环境中。使用时应避免与水分接触, 以防硼酸酯水解。操作时需佩戴防护手套和护目镜, 在通风良好的环境下进行。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测, 纯度 $\geq 96\%$ 。MS 和 NMR 数据可用于进一步验证结构。安全

信息方面，该化合物可能对眼睛、皮肤和呼吸道有刺激性，使用时需遵循实验室安全规范。如不慎接触，应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应按照危险化学品处理标准处置。