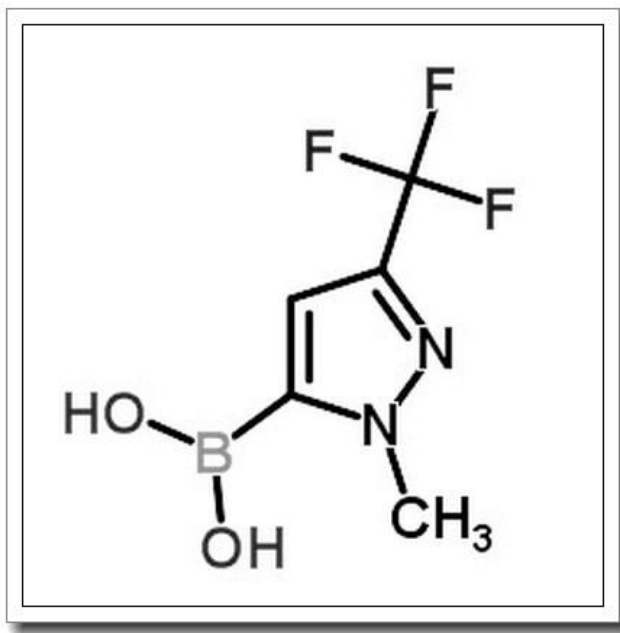


1-甲基-3-三氟甲基吡唑-5-硼酸

1-Methyl-3-trifluoromethylpyrazole-5-boronic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-Methyl-3-trifluoromethylpyrazole-5-boronic acid
中文名称	1-甲基-3-三氟甲基吡唑-5-硼酸
CAS 号	344591-91-9
分子式	C ₅ H ₆ BF ₃ N ₂ O ₂
分子量	193.919
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

1-甲基-3-三氟甲基吡唑-5-硼酸 (1-Methyl-3-trifluoromethylpyrazole-5-boronic acid) 是一种含硼有机化合物, CAS 号为 344591-91-9, 分子式为 $C_5H_6BF_3N_2O_2$, 分子量为 193.919。该化合物以白色至类白色结晶或粉末形式存在, 纯度通常高于 96%。其结构中包含吡唑环、三氟甲基和硼酸基团, 具有良好的稳定性和反应活性, 尤其在 Suzuki-Miyaura 偶联反应中表现出优异的性能。

2. 生物化学功能与重要性

作为硼酸类衍生物, 该化合物在有机合成中扮演重要角色, 特别是作为关键中间体用于构建复杂分子结构。其硼酸基团可与卤代烃或芳基卤化物发生偶联反应, 广泛应用于药物分子和功能材料的合成。三氟甲基的引入增强了化合物的脂溶性和代谢稳定性, 使其在药物化学中具有特殊价值。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于医药研发、农药合成以及材料科学领域。在药物化学中, 它是合成抗炎、抗肿瘤等活性分子的重要砌块; 在农药领域, 可用于开发高效低毒的新型杀虫剂或杀菌剂; 在材料科学中, 可作为功能高分子材料的单体或改性剂。此外, 它还可用于荧光探针和配体设计等研究。

4. 储存条件与使用建议

建议在 2-8°C 的干燥环境中避光保存, 长期储存需置于惰性气体 (如氮气) 保护下。使用时需在干燥惰性气氛 (如氩气) 下操作, 避免接触水分或强氧化剂。溶解时可选用四氢呋喃、二甲基亚砜等极性有机溶剂, 溶液现配现用。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测, 纯度 $\geq 96\%$, 并提供详细的核磁共振 (NMR) 和质谱 (MS) 分析数据。安全方面, 该化合物对眼睛、皮肤和呼吸道有刺激性, 操作时应佩戴防护手套、护目镜和防尘口罩。若不慎接触, 需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应按照国家危险化学品处理规范处置。