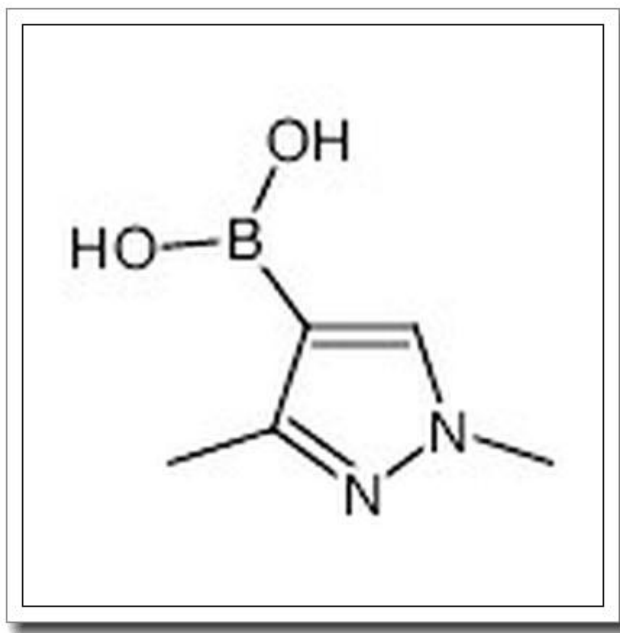


1,3-二甲基吡唑-4-硼酸

(1,3-dimethylpyrazol-4-yl)boronic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	(1,3-dimethylpyrazol-4-yl)boronic acid
中文名称	1,3-二甲基吡唑-4-硼酸
CAS 号	1146616-03-6
分子式	C ₅ H ₉ BN ₂ O ₂
分子量	139.948
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

(1,3-二甲基吡唑-4-硼酸)是一种有机硼化合物，化学式为 $C_5H_9BN_2O_2$ ，分子量为 139.948，CAS 号为 1146616-03-6。该化合物为白色至类白色结晶粉末，纯度通常高于 96%。其结构中的硼酸基团与吡唑环的 4 位相连，1 位和 3 位分别被甲基取代，赋予其独特的反应活性和稳定性。该化合物易溶于极性有机溶剂如甲醇、二甲基亚砷(DMSO)，微溶于水，需在惰性气体保护下保存以避免潮解。

2. 生物化学功能与重要性

作为硼酸类衍生物，该化合物在 Suzuki-Miyaura 偶联反应中表现出优异的催化活性，能够高效构建碳-碳键。其吡唑环结构提供了良好的配位能力，可与过渡金属形成稳定络合物，广泛应用于药物分子和功能材料的合成。在生物化学领域，其硼酸基团可与糖类、氨基酸等生物分子发生特异性结合，常用于糖蛋白标记和酶抑制剂开发。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于医药中间体合成，特别是抗肿瘤药物和抗病毒药物的研发。在材料科学中，可用于制备有机电致发光材料(OLED)和液晶显示材料。此外，在农药化学领域，作为杀菌剂和杀虫剂的关键前体。具体应用包括：Suzuki 偶联反应中的硼酸试剂、金属有机框架材料(MOFs)的构建单元、生物传感器探针分子的修饰基团。

4. 储存条件与使用建议

建议储存于 $-20^{\circ}C$ 的干燥惰性气体环境中，使用密封良好的棕色玻璃瓶包装。开封后需在氮气保护下取用，避免长时间暴露于空气中。溶解时应选用无水级溶剂，反应体系需严格除氧。建议现配现用，溶液状态不宜超过 24 小时。操作时需在通风橱中进行，避免直接接触皮肤和眼睛。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，水分含量控制在 0.5% 以下，重金属残留符合 USP 标准。安全数据表明，该物质对眼睛和呼吸道有刺激性，操作时应佩戴护目镜、防

尘口罩和丁腈手套。如发生接触，立即用大量清水冲洗 15 分钟并就医。废弃物应作为有害化学品处理，不可直接排入下水道。运输分类为 UN2811，需符合危险化学品运输规范。

注：本说明基于现有实验数据编制，具体应用需结合实际反应条件优化。建议用户在使用前查阅最新版材料安全数据表(MSDS)获取完整安全信息。