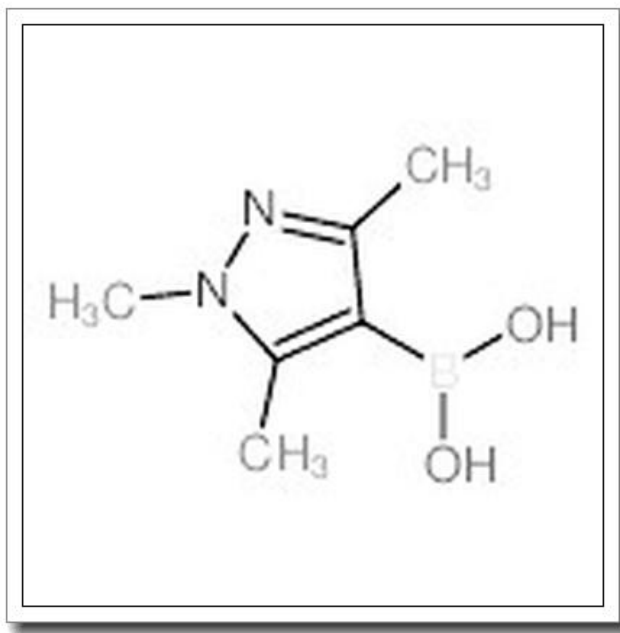


(1,3,5-三甲基-1H-吡唑-4-基)硼酸

(1,3,5-trimethylpyrazol-4-yl)boronic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	(1,3,5-trimethylpyrazol-4-yl)boronic acid
中文名称	(1,3,5-三甲基-1H-吡唑-4-基)硼酸
CAS 号	847818-62-6
分子式	C ₆ H ₁₁ BN ₂ O ₂
分子量	153.975
纯度	>96%

产品说明

(1, 3, 5-三甲基-1H-吡唑-4-基)硼酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

(1, 3, 5-三甲基-1H-吡唑-4-基)硼酸 (英文名称: (1, 3, 5-trimethylpyrazol-4-yl)boronic acid) 是一种有机硼酸类化合物, CAS 号为 847818-62-6, 分子式为 $C_6H_{11}BN_2O_2$, 分子量为 153.975。本品为白色至类白色固体, 纯度 >96%, 具有硼酸基团与吡唑环结合的独特结构, 使其在有机合成中表现出良好的反应活性。该化合物在常温下稳定, 可溶于多种有机溶剂, 如甲醇、乙醇和二甲基亚砜 (DMSO)。

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 偶联反应中可作为关键中间体, 广泛应用于碳-碳键的构建。其吡唑环结构赋予其潜在的生物活性, 在药物化学中常用于靶向分子的设计与合成。此外, 硼酸基团与生物分子中的羟基或氨基的相互作用, 使其在化学生物学和材料科学领域具有重要研究价值。

3. 主要应用领域与具体用途

(1, 3, 5-三甲基-1H-吡唑-4-基)硼酸主要用于以下领域:

- 药物研发: 作为合成抗肿瘤、抗炎或抗菌药物的中间体。
- 材料科学: 参与制备功能性高分子材料或液晶材料。
- 化学合成: 用于构建复杂有机分子骨架, 如杂环化合物或天然产物类似物。
- 催化剂开发: 作为配体参与过渡金属催化反应。

4. 储存条件与使用建议

本品需密封保存于干燥、避光的环境中, 推荐储存温度为 2-8° C, 长期保存建议充入惰性气体 (如氮气)。使用前需恢复至室温并避免接触水分, 以防硼酸基团水解。实验操作应在通风橱中进行, 并佩戴防护手套和护目镜。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和 NMR 严格检测, 确保纯度 >96%。安全信息如下:

- 安全术语: 可能对眼睛、皮肤和呼吸系统造成刺激, 操作时需遵循实验室安全规

范。

- 应急处理：如接触皮肤或眼睛，立即用大量清水冲洗并就医。
- 废弃物处理：按危险化学品废弃物处置法规处理，避免直接排放至环境中。

本产品仅供科研用途，不适用于医药或食品领域。