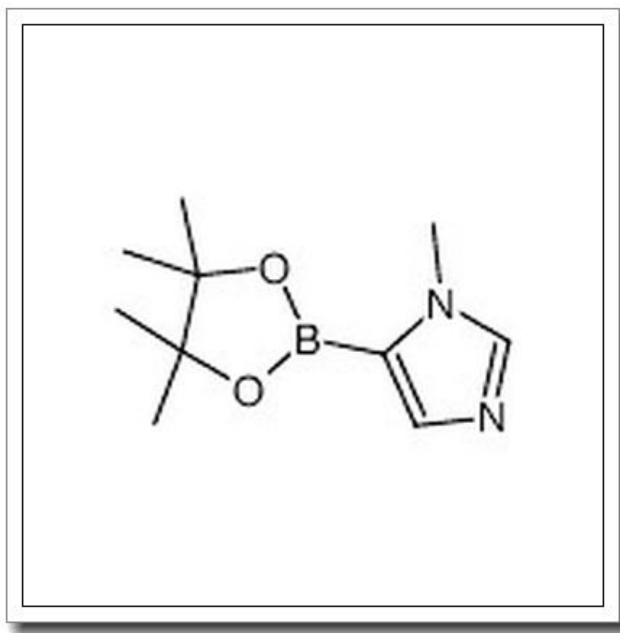


1-甲基-1H-咪唑-5-硼酸频那醇酯

1-methyl-5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)imidazole



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-methyl-5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)imidazole
中文名称	1-甲基-1H-咪唑-5-硼酸频那醇酯
CAS 号	942070-72-6
分子式	C ₁₀ H ₁₇ BN ₂ O ₂
分子量	208.065
纯度	>96%

产品说明

1-甲基-1H-咪唑-5-硼酸频那醇酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

1-甲基-1H-咪唑-5-硼酸频那醇酯 (CAS 号: 942070-72-6) 是一种重要的有机硼酸酯衍生物, 化学式为 $C_{10}H_{17}BN_2O_2$, 分子量为 208.065。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%。其结构中的硼酸频那醇酯基团赋予其良好的稳定性和反应活性, 适用于多种偶联反应。该产品易溶于常见有机溶剂如二甲基亚砜 (DMSO)、四氢呋喃 (THF) 和乙腈, 但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

作为咪唑类硼酸酯化合物, 该产品在有机合成中扮演关键角色, 尤其是作为 Suzuki-Miyaura 偶联反应的中间体。其结构中的硼原子可与卤代烃或三氟甲磺酸酯发生交叉偶联, 高效构建碳-碳键。此外, 咪唑环的氮原子可参与配位或氢键形成, 使其在药物化学和材料科学中具有广泛的应用潜力。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于医药中间体、农药合成及功能材料开发。在药物研发中, 常用于构建含咪唑环的活性分子, 如激酶抑制剂和抗肿瘤化合物。在材料领域, 可作为有机发光二极管 (OLED) 或液晶材料的合成前体。此外, 其硼酸酯基团还可用于生物标记和分子探针的制备。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 下避光保存, 置于干燥惰性气体 (如氮气或氩气) 环境中, 以延长 shelf life。开封后需避免反复冻融, 防止吸湿降解。使用时应佩戴防护手套和护目镜, 在通风橱中操作。溶解时优先选择无水溶剂, 若需长期保存溶液, 建议添加分子筛除水。

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 $>96\%$ 。可能含微量硼酸副产物, 需根据实验需求进一步纯化。安全数据表明, 该化合物对眼睛和皮肤有刺激性, 操作时

需避免直接接触。若不慎吸入或误服，应立即就医并提供 MSDS 信息。废弃物处理需符合当地环保法规，建议通过专业化学废料回收程序处置。