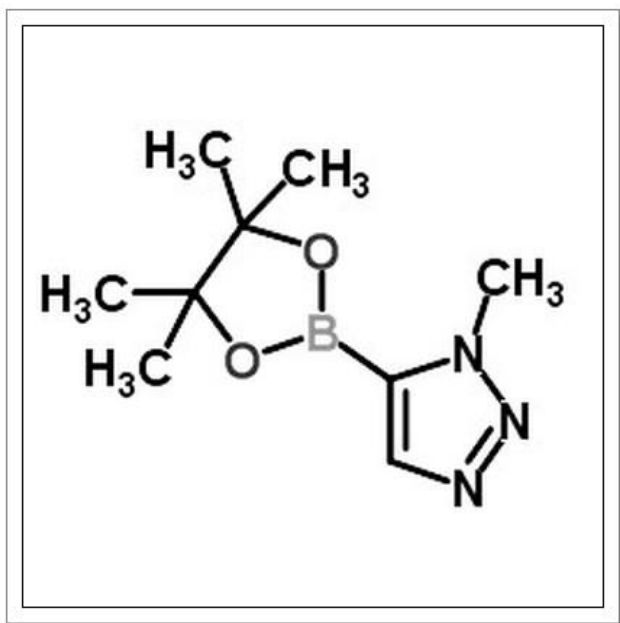


# 1-甲基-5-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二噁硼烷-2-基)-1H-1,2,3-噻唑

*1-Methyl-5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-1H-1,2,3-triazole*



## 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)-1H-1,2,3-triazole
中文名称	1-甲基-5-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二噁硼烷-2-基)-1H-1,2,3-噻唑
CAS 号	1047636-97-4
分子式	C <sub>9</sub> H <sub>16</sub> BN <sub>3</sub> O <sub>2</sub>
分子量	209.053
纯度	>96%

## 产品说明

### 1. 产品概述与化学特性

1-甲基-5-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二噁硼烷-2-基)-1H-1,2,3-噻唑 (CAS 号: 1047636-97-4) 是一种含硼杂环化合物, 分子式为  $C_9H_{16}BN_3O_2$ , 分子量为 209.053。该化合物以白色至类白色固体形式存在, 纯度通常高于 96%。其结构中的硼酸酯基团 (4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二噁硼烷) 和 1,2,3-三唑环赋予其独特的反应活性, 尤其在 Suzuki-Miyaura 偶联反应中表现出色。

### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为硼酸酯衍生物, 在有机合成和药物化学中具有重要价值。其硼酸酯基团可作为高效的偶联试剂, 广泛应用于碳-碳键形成反应。此外, 1,2,3-三唑环结构在药物设计中常见, 因其具有优异的生物活性和代谢稳定性。该分子在构建复杂杂环体系和生物活性分子中扮演关键角色。

### 3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于以下领域:

- 药物研发: 作为中间体用于合成抗肿瘤、抗病毒等靶向药物。
- 材料科学: 参与制备有机发光二极管 (OLED) 和功能高分子材料。
- 化学生物学: 用于标记和修饰生物分子, 如蛋白质和核酸的硼酸酯化。
- 有机合成: 作为 Suzuki 偶联反应的关键试剂, 构建芳基-芳基或芳基-杂芳基骨架。

### 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) 环境中。开封后需密封防潮, 避免与水分或强氧化剂接触。使用时应在惰性气氛 (如氩气) 下操作, 溶解性测试表明其易溶于二甲基亚砜 (DMSO) 和四氢呋喃 (THF)。

### 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  $>96\%$ 。安全注意事项包括:

- 避免吸入粉尘或接触皮肤, 操作时需佩戴防护手套和护目镜。

- 如意外接触，立即用大量清水冲洗并就医。
- 废弃物应按照危险化学品规范处置。
- 安全数据表（SDS）可应要求提供，包含详细毒理学和应急处理信息。