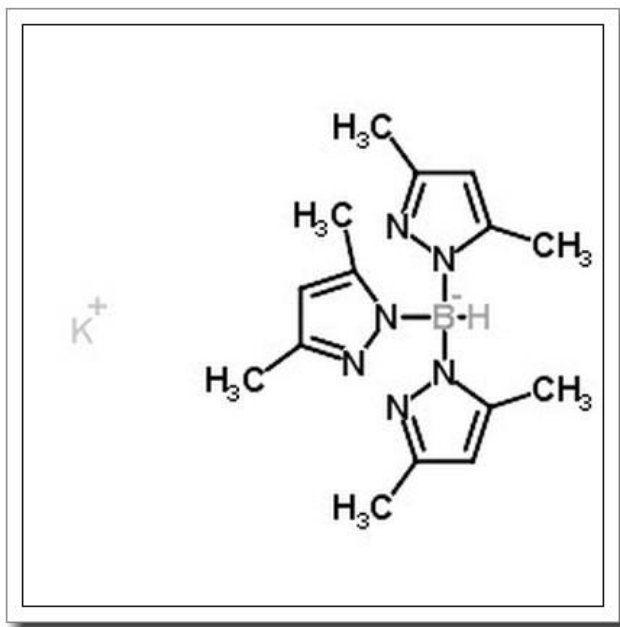


三(3,5-二甲基吡唑-1-基)硼酸氢钾

potassium, tris(3,5-dimethylpyrazol-1-yl)boranuide



产品基本信息

属性	值
化学名称	potassium, tris(3,5-dimethylpyrazol-1-yl)boranuide
中文名称	三(3,5-二甲基吡唑-1-基)硼酸氢钾
CAS 号	17567-17-8
分子式	C ₁₅ H ₂₁ BKN ₆
分子量	336.285
纯度	>96%

产品说明

三(3,5-二甲基吡唑-1-基)硼酸氢钾产品说明书

1. 产品概述与化学特性

三(3,5-二甲基吡唑-1-基)硼酸氢钾 (Potassium tris(3,5-dimethylpyrazol-1-yl)borohydride) 是一种有机硼酸盐化合物, 化学式为 $C_{15}H_{21}BKN_6$, 分子量 336.285, CAS 号为 17567-17-8。本品为白色至类白色结晶性粉末, 纯度高于 96%, 具有良好的溶解性和稳定性。其结构中包含三个 3,5-二甲基吡唑基团与硼原子配位, 形成稳定的阴离子配合物, 钾离子作为反离子平衡电荷。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物是一种高效的还原剂和配体前体, 在有机合成和金属催化反应中表现出显著活性。其硼氢键 (B-H) 可选择性还原羰基化合物, 而吡唑基团能作为多齿配体与过渡金属 (如铜、钯等) 形成稳定配合物, 广泛应用于交叉偶联反应和不对称催化。此外, 其在生物化学研究中可作为酶抑制剂或金属蛋白模拟物的合成中间体。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药领域, 本品用于合成抗肿瘤和抗炎药物的关键中间体。在材料科学中, 可用于制备功能性配位聚合物或金属有机框架 (MOFs)。工业上, 它作为催化剂组分参与精细化学品生产, 如农药和液晶材料的合成。实验室中常用于以下反应: 1. 羰基化合物的选择性还原; 2. 过渡金属催化剂的制备; 3. 硼烷类试剂的衍生化反应。

4. 储存条件与使用建议

本品需密封保存于干燥、阴凉处 (建议 2-8°C), 避免与湿气和氧化剂接触。开封后建议充惰性气体 (如氮气) 保护以延长稳定性。使用时需在惰性气氛 (氩气/氮气) 下操作, 佩戴防护手套和护目镜。溶解性测试表明易溶于四氢呋喃 (THF)、二甲基亚砜 (DMSO), 微溶于甲醇, 不溶于正己烷。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 重金属含量低于 10 ppm。安全数据表明, 其 LD50

(大鼠口服) >2000 mg/kg, 属于低毒类物质, 但仍可能引起眼睛和皮肤刺激。意外接触时需立即用大量清水冲洗, 并就医处理。废弃物处置应遵循当地化学品管理法规, 禁止直接排放至环境中。运输时按普通化学品分类, 需避免与强酸强碱混装。

注: 本说明基于现有研究数据编制, 具体应用需结合实验条件优化。建议用户在使用前查阅最新文献并开展小试实验。