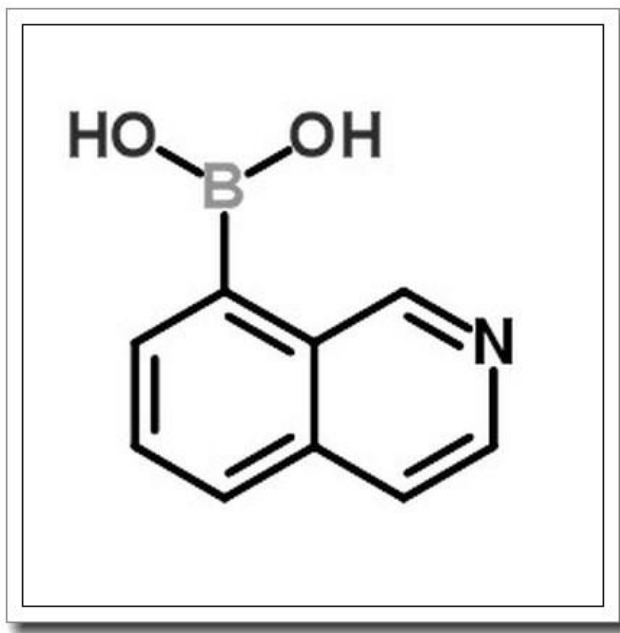


异喹啉-8-硼酸

isoquinolin-8-ylboronic acid



产品基本信息

| 属性 | 值 |
|-------|--|
| 化学名称 | isoquinolin-8-ylboronic acid |
| 中文名称 | 异喹啉-8-硼酸 |
| CAS 号 | 721401-43-0 |
| 分子式 | C ₉ H ₈ BN ₂ O ₂ |
| 分子量 | 172.976 |
| 纯度 | >96% |

产品说明

1. 产品概述与化学特性

异喹啉-8-硼酸 (isoquinolin-8-ylboronic acid) 是一种有机硼化合物，化学式为 $C_9H_8BN_2O_2$ ，分子量为 172.976，CAS 号为 721401-43-0。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%。其结构中的硼酸基团 ($-B(OH)_2$) 与异喹啉环的 8 位碳相连，赋予其独特的反应活性，尤其在 Suzuki-Miyaura 偶联反应中表现出高效性。该化合物可溶于多种有机溶剂（如甲醇、二甲基亚砷），但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

作为硼酸类衍生物，异喹啉-8-硼酸在药物化学和材料科学中具有重要价值。其硼酸基团可作为关键中间体，参与构建复杂杂环体系，尤其适用于抗癌、抗菌等生物活性分子的合成。异喹啉骨架本身是多种天然生物碱的核心结构，因此其硼酸衍生物在仿生合成和药物修饰中具有广泛潜力。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于以下领域：

- (1) 医药研发：作为 Suzuki 偶联反应的底物，用于合成含异喹啉结构的候选药物分子。
- (2) 材料科学：参与制备有机发光二极管 (OLED) 中的电子传输材料。
- (3) 化学研究：作为配体或催化剂组分，用于过渡金属催化反应。

典型应用案例包括抗疟疾化合物和激酶抑制剂的中间体制备。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 、干燥惰性气体（如氩气）保护下避光保存，长期储存需置于密封容器中。使用时需在手套箱或通风橱中操作，避免接触水分和空气以防止硼酸基团水解。溶解时建议先用少量极性溶剂（如 DMSO）预溶，再稀释至所需浓度。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，并符合核磁共振 (1H NMR) 和质谱 (MS) 的结构

确证标准。安全数据表明，该化合物可能对眼睛、皮肤和呼吸系统造成刺激，操作时应佩戴防护手套、护目镜和防尘口罩。若不慎接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物需按危险化学品规范处置。

（注：实际使用前请查阅最新版物质安全数据表 MSDS 并遵守当地法规。）