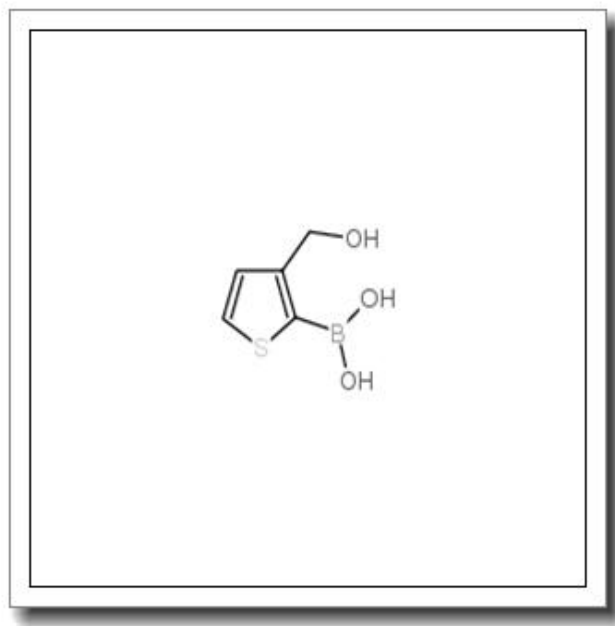


# 产品\_4139

*[3-(hydroxymethyl) thiophen-2-yl]boronic acid*



## 产品基本信息

| 属性    | 值   |
|-------|---|
| 化学名称  | [3-(hydroxymethyl) thiophen-2-yl]boronic acid                 |
| 中文名称  | 产品_4139   |
| CAS 号 | 222840-73-5   |
| 分子式   | C <sub>5</sub> H <sub>7</sub> B <sub>0</sub> O <sub>3</sub> S |
| 分子量   | 157.983   |
| 纯度    | ≥96%  |

## 产品说明

### 1. 产品概述与化学特性

[3-(羟甲基)噻吩-2-基]硼酸 (产品\_4139) 是一种有机硼酸衍生物, 化学式为  $C_5H_7BO_3S$ , 分子量为 157.983。该化合物为白色至类白色结晶粉末, 纯度  $\geq 96\%$ , CAS 号为 222840-73-5。其结构中的硼酸基团和噻吩环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。该化合物易溶于极性有机溶剂如甲醇、二甲基亚砷 (DMSO), 但在水中溶解度较低, 需注意避光保存以防分解。

### 2. 生物化学功能与重要性

作为硼酸类化合物, 产品\_4139 在过渡金属催化反应中作为关键中间体, 能够与卤代芳烃形成碳-碳键, 广泛应用于药物分子和功能材料的合成。其羟甲基侧链增强了分子的水溶性和衍生化潜力, 使其在生物共轭和靶向递送系统中具有潜在应用价值。该化合物在医药研发领域尤为重要, 常用于构建含噻吩环的活性分子骨架。

### 3. 主要应用领域与具体用途

产品\_4139 主要用于以下领域:

- 药物研发: 作为抗肿瘤、抗感染药物合成中的硼酸酯前体。
- 材料科学: 参与制备有机发光二极管 (OLED) 和导电高分子材料的中间体。
- 化学生物学: 用于蛋白质标记和生物探针的构建。

具体应用中, 需在惰性气体保护下进行反应以避免硼酸基团氧化, 推荐与钯催化剂配合使用以实现高效偶联。

### 4. 储存条件与使用建议

该产品需密封保存于  $2-8^{\circ}C$  干燥环境中, 长期储存建议充入惰性气体。开封后需尽快使用, 剩余部分应重新密封并避免接触水分。使用前建议通过核磁共振 (NMR) 或高效液相色谱 (HPLC) 验证纯度, 反应体系中需严格除氧。操作时佩戴防护手套和护目镜, 避免吸入粉尘。

### 5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度  $\geq 96\%$ , 重金属含量符合 ACS 标准。安全数据表 (SDS)

显示其具有刺激性，可能引起皮肤和眼睛不适。若不慎接触，应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需遵循当地法规，不可直接排放至环境中。运输分类为非危险品，但建议使用防潮包装。

注：以上信息基于实验室环境下的测试结果，实际应用需根据具体工艺条件调整。