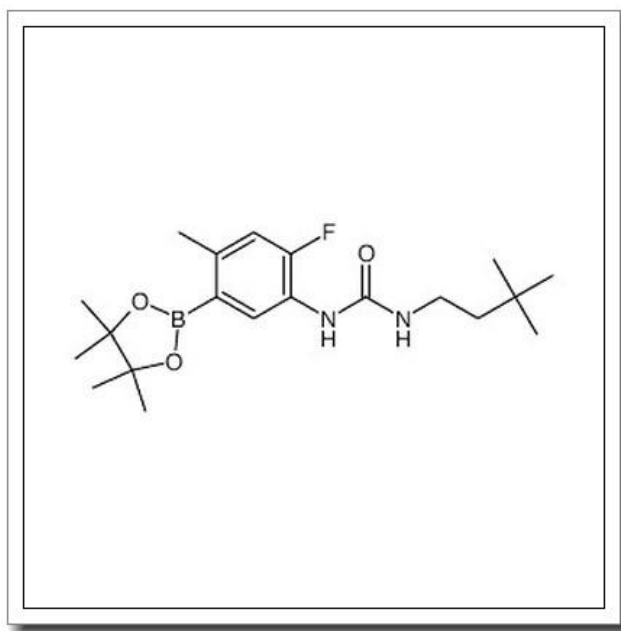


# 1-(3,3-dimethylbutyl)-3-(2-fluoro-4-methyl-5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)phenyl)urea

*1-(3,3-dimethylbutyl)-3-(2-fluoro-4-methyl-5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)phenyl)urea*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	1-(3,3-dimethylbutyl)-3-(2-fluoro-4-methyl-5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)phenyl)urea
中文名称	1-(3,3-dimethylbutyl)-3-(2-fluoro-4-methyl-5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)phenyl)urea
CAS 号	1454682-74-6
分子式	C <sub>20</sub> H <sub>32</sub> BFN <sub>2</sub> O <sub>3</sub>
分子量	378.289

纯度	>96%
----	------

## 产品说明

### 1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 1-(3,3-二甲基丁基)-3-(2-氟-4-甲基-5-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼杂环戊烷-2-基)苯基)脲, CAS 号为 1454682-74-6, 分子式为  $C_{20}H_{32}BFN_2O_3$ , 分子量为 378.289。其纯度高于 96%, 是一种含硼有机化合物, 具有独特的苯基脲结构和硼酸酯官能团。该化合物在常温下为白色至类白色固体, 具有良好的化学稳定性和溶解性, 适用于有机合成和生物化学研究。

### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为硼酸酯衍生物, 在生物化学研究中具有重要作用。其硼酸酯基团可作为 Suzuki-Miyaura 偶联反应的关键中间体, 广泛应用于药物分子和功能材料的合成。此外, 苯基脲结构可能赋予其潜在的生物活性, 如酶抑制或受体调节功能, 因此在药物开发和化学生物学研究中具有重要价值。

### 3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药研发和有机合成领域。具体用途包括: 作为小分子抑制剂或探针用于靶标蛋白研究; 作为硼酸酯前体参与偶联反应, 构建复杂分子骨架; 在药物化学中用于优化先导化合物的药代动力学性质。此外, 它还可用于材料科学中功能分子的设计与合成。

### 4. 储存条件与使用建议

建议在  $-20^{\circ}C$  下避光干燥储存, 长期保存需充惰性气体保护。使用时需在干燥惰性气氛 (如氮气或氩气) 下操作, 避免接触水分和强氧化剂。溶解时可选用无水 DMF 或 DMSO 等极性溶剂。实验操作应在通风橱中进行, 并佩戴适当的个人防护装备。

### 5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度  $\geq 96\%$ , 并提供详细的质谱和核磁数据支持。其安全信息如下: 可能对眼睛、皮肤和呼吸系统造成刺激, 操作时应避免直接接触。如不慎接

触，需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应按照危险化学品处理规范处置。具体安全数据请参考产品附带的MSDS（材料安全数据表）。