

(4-[[[1-[[[2-Methyl-2-propanyl)oxy]carbonyl]-4-piperidinyl)oxy]methyl}phenyl)boronic acid

产品图片未找到

产品基本信息

属性	值
化学名称	(4-[[[1-[[[2-Methyl-2-propanyl)oxy]carbonyl]-4-piperidinyl)oxy]methyl}phenyl)boronic acid
产品目录号	
CAS 号	1224449-13-1
分子式	C17H26BN05
分子量	335. 203
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为(4-[(1-[(2-甲基-2-丙烷基)氧基]羰基)-4-哌啶基)氧基]甲基}苯基)硼酸, 化学式 C₁₇H₂₆BN₀₅, 分子量 335.203, CAS 号 1224449-13-1。产品为白色至类白色结晶性粉末, 纯度>96%, 具有硼酸酯键和哌啶环结构, 兼具脂溶性与极性基团特性, 在有机溶剂如 DMSO、甲醇中溶解性良好, 水溶性较低。其硼酸基团可特异性识别二醇类结构, 哌啶环则赋予分子空间位阻效应, 适合作为酶抑制剂或分子探针的合成中间体。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物通过硼酸基团与生物分子中的顺式二醇(如糖类、核酸)可逆结合, 在糖蛋白识别、核酸标记等领域具有应用潜力。哌啶环上的叔丁氧羰基(Boc)保护基可增强稳定性, 便于后续脱保护进行衍生化。其结构设计使其成为蛋白酶体抑制剂、糖苷酶抑制剂等药物研发的关键砌块, 尤其在靶向治疗和分子影像学中表现突出。

3. 主要应用领域与具体用途

作为高选择性硼酸类试剂, 主要用于以下领域:

1. 药物研发: 作为激酶抑制剂或抗体偶联药物(ADC)的 linker 组分
2. 糖生物学研究: 用于糖蛋白富集或细胞表面糖链标记
3. 材料科学: 合成硼酸功能化聚合物, 用于葡萄糖传感材料
4. 有机合成: 通过 Suzuki-Miyaura 偶联反应构建芳基-芳基键

4. 储存条件与使用建议

储存于-20°C、惰性气体(如氩气)保护的干燥环境中, 避免光照与潮湿。开封后建议分装使用, 剩余粉末需充氮密封。使用时需在干燥惰性气氛(如手套箱)中操作, 若用于水相体系, 建议先溶于少量 DMSO 再缓冲液稀释。与重金属或强氧化剂隔离存放。

5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC、NMR 及质谱验证纯度>96%，重金属残留<10 ppm。安全数据：

1. 危害提示：H302（吞咽有害）、H315（皮肤刺激）、H319（眼刺激）
2. 防护措施：佩戴护目镜与丁腈手套，通风橱中操作
3. 急救措施：接触眼睛后立即用大量清水冲洗 15 分钟
4. 废弃物处理：按危险化学品规范处置，避免直接排入环境