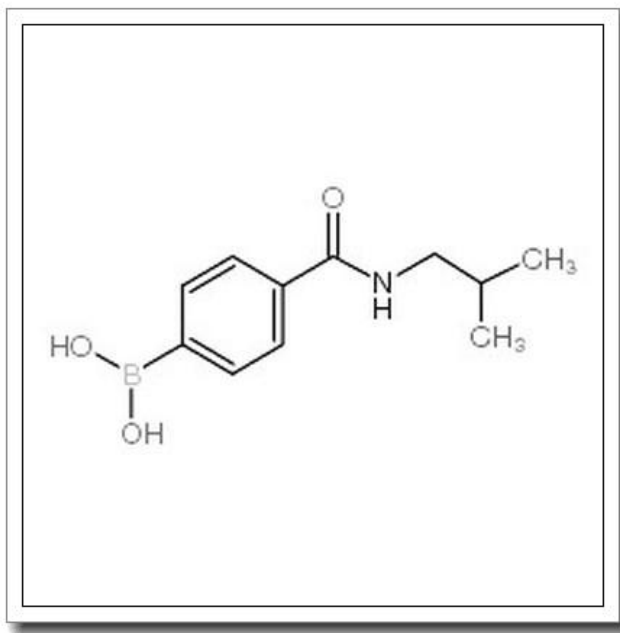


# 4-(异丁基氨甲酰基)苯硼酸

*(4-(Isobutylcarbamoyl)phenyl)boronic acid*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	(4-(Isobutylcarbamoyl)phenyl)boronic acid
中文名称	4-(异丁基氨甲酰基)苯硼酸
CAS 号	850568-13-7
分子式	C <sub>11</sub> H <sub>16</sub> BN <sub>3</sub>
分子量	221.061
纯度	>96%

## 产品说明

### 4-(异丁基氨甲酰基)苯硼酸产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

4-(异丁基氨甲酰基)苯硼酸 (化学名称: 4-(Isobutylcarbamoyl)phenyl)boronic acid) 是一种有机硼化合物, CAS 号为 850568-13-7, 分子式为 C<sub>11</sub>H<sub>16</sub>BN<sub>03</sub>, 分子量为 221.061。该化合物以白色至类白色结晶粉末形式存在, 纯度高于 96%, 具有苯硼酸基团与异丁基氨甲酰基的协同结构特性, 使其在极性有机溶剂 (如甲醇、二甲基亚砷) 中表现出良好的溶解性, 同时在水中的溶解度较低。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为苯硼酸衍生物, 该化合物可通过硼原子与顺式二醇基团的可逆共价结合, 特异性识别糖类、核苷酸等生物分子。其异丁基氨甲酰基的引入增强了疏水相互作用, 在药物设计中被广泛用于靶向蛋白的构效关系研究, 尤其是作为蛋白酶抑制剂或糖类传感器的关键中间体。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发领域, 本品是合成抗糖尿病药物 (如 SGLT2 抑制剂) 的重要砌块, 也可用于开发硼中子俘获治疗 (BNCT) 的靶向剂。在材料科学中, 可作为有机发光二极管 (OLED) 的配体前体。此外, 在生化检测中用于构建糖响应型荧光探针, 或作为固定化酶载体功能化试剂。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 -20°C 干燥环境中, 避免光照与湿气。开封后需充惰性气体保护以延长稳定性。使用前需恢复至室温并短暂离心, 溶解时建议采用无水乙醇或 DMF 超声助溶。工作浓度需根据实验体系优化, 推荐先进行 0.1-10 mM 范围梯度测试。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 验证纯度 >96%, 重金属含量 <10 ppm。操作时需佩戴防护手套及护目镜, 避免吸入粉尘或接触皮肤。如意外接触, 立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应作为有害化学品处置, 遵守当地环保法规。

(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验证。)