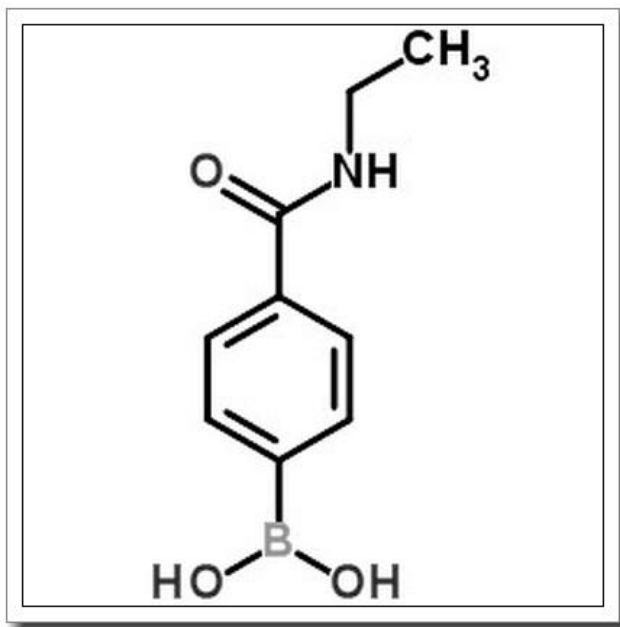


# 4-(甲基氨基甲酰基)苯硼酸

*4-(N-Methylaminocarbonyl)phenylboronic acid*



## 产品基本信息

| 属性    | 值   |
|-------|---|
| 化学名称  | 4-(N-Methylaminocarbonyl)phenylboronic acid |
| 中文名称  | 4-(甲基氨基甲酰基)苯硼酸                              |
| CAS 号 | 121177-82-0                                 |
| 分子式   | C9H12BN03                                   |
| 分子量   | 193.008                                     |
| 纯度    | >96%  |

## 产品说明

### 4-(甲基氨基甲酰基)苯硼酸产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

4-(甲基氨基甲酰基)苯硼酸 (CAS 号: 121177-82-0) 是一种有机硼化合物, 分子式为  $C_9H_{12}BN_2O_3$ , 分子量 193.008。该化合物为白色至类白色结晶粉末, 纯度 >96%, 具有苯硼酸基团与甲基氨基甲酰基的双功能结构。其硼酸基团可与二醇类化合物形成可逆共价键, 而氨基甲酰基则赋予其一定的极性, 使其在有机溶剂 (如甲醇、DMSO) 中具有中等溶解性。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为苯硼酸衍生物, 该化合物可通过硼酸酯化反应特异性识别顺式二醇结构, 这一特性使其成为糖类、核苷酸等生物分子修饰的重要工具。甲基氨基甲酰基的引入增强了分子稳定性, 并可能参与氢键相互作用, 在药物偶联或靶向递送系统中发挥关键作用。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

该产品广泛应用于医药研发与材料科学领域。在药物化学中, 常用于制备蛋白酪氨酸激酶抑制剂中间体或作为 PET 显影剂的标记前体。在材料领域, 可作为功能单体参与制备响应性高分子材料 (如葡萄糖敏感水凝胶)。此外, 在化学生物学研究中, 其硼酸基团可用于糖蛋白的可逆标记与富集。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于  $-20^{\circ}C$  干燥环境中, 避免光照与湿气。开封后需充惰性气体保护, 以防止硼酸基团氧化。使用时需在干燥惰性气氛 (如氮气) 下操作, 推荐以无水 DMSO 配制母液 (浓度  $\leq 50$  mM), 现配现用。与含二醇试剂反应时, 需控制 pH 7-9 以获得最佳结合效率。

#### 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。安全数据表明其急性毒性较低 (LD50 大鼠口服 >2000 mg/kg), 但仍需避免吸入或皮肤直接接触。操作时应佩戴

防护手套及护目镜，若意外接触眼部，需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置需符合当地化学品管理法规。

（注：本说明基于现有研究数据编制，实际应用前请查阅最新文献并开展小试验证。）