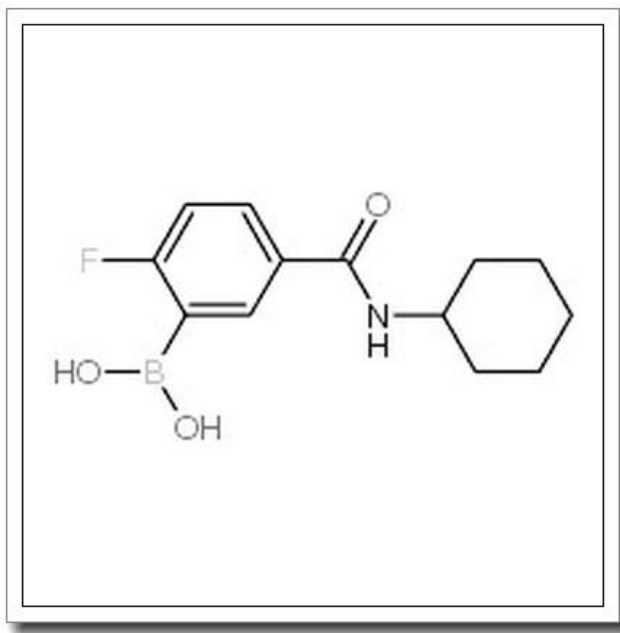


5-环己基氨甲酰基-2-氟苯硼酸

(5-(Cyclohexylcarbamoyl)-2-fluorophenyl)boronic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	(5-(Cyclohexylcarbamoyl)-2-fluorophenyl)boronic acid
中文名称	5-环己基氨甲酰基-2-氟苯硼酸
CAS 号	874289-44-8
分子式	C13H17BFN03
分子量	265.088
纯度	>96%

产品说明

5-环己基氨甲酰基-2-氟苯硼酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为(5-(Cyclohexylcarbamoyl)-2-fluorophenyl)boronic acid, CAS 号 874289-44-8, 分子式 C₁₃H₁₇BFN₃O₃, 分子量 265.088, 是一种含氟苯硼酸衍生物。其结构特征为苯环上同时具有氟原子、硼酸基团及环己基氨甲酰基, 赋予其独特的电子效应和空间位阻。常温下为白色至类白色结晶性粉末, 纯度 ≥96%, 易溶于极性有机溶剂如 DMSO、甲醇, 微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为硼酸类化合物, 该分子可通过硼酸酯化反应与二醇或羟基选择性结合, 这一特性使其成为糖类识别、蛋白标记的重要工具。环己基氨甲酰基的引入增强了疏水性, 适用于细胞膜穿透性研究; 氟原子的存在则提升了代谢稳定性, 在药物设计中被广泛用于靶向酶抑制剂的开发。

3. 主要应用领域与具体用途

- 3.1 医药研发: 作为 Suzuki 偶联反应的关键中间体, 用于构建含氟生物活性分子, 尤其在激酶抑制剂和抗肿瘤药物合成中具有重要价值。
- 3.2 材料科学: 参与制备有机发光二极管 (OLED) 的含硼电子传输材料。
- 3.3 生化探针: 通过硼酸-二醇特异性结合, 开发血糖监测传感器或糖蛋白标记试剂。

4. 储存条件与使用建议

- 4.1 储存条件: 需避光密封保存于-20℃干燥环境中, 湿度控制在 40%以下。
- 4.2 稳定性: 对空气敏感, 建议充氮保护; 溶液现配现用, 避免长期暴露于碱性条件。
- 4.3 操作建议: 佩戴防尘口罩及丁腈手套, 于通风橱中称量, 避免吸入粉尘。

5. 质量控制与安全信息

- 5.1 质量控制: 采用 HPLC 检测纯度, 核磁共振 (¹H/¹³C NMR) 及质谱 (MS) 验证

结构。

5.2 安全数据：根据 GHS 分类，该产品可能造成皮肤刺激（H315）和眼刺激（H319），操作时需佩戴防护装备。

5.3 废弃物处理：按危险化学品处置，避免直接排放至下水道。

本产品仅供科研用途，不适用于诊断或治疗。具体应用需结合实验体系优化条件。