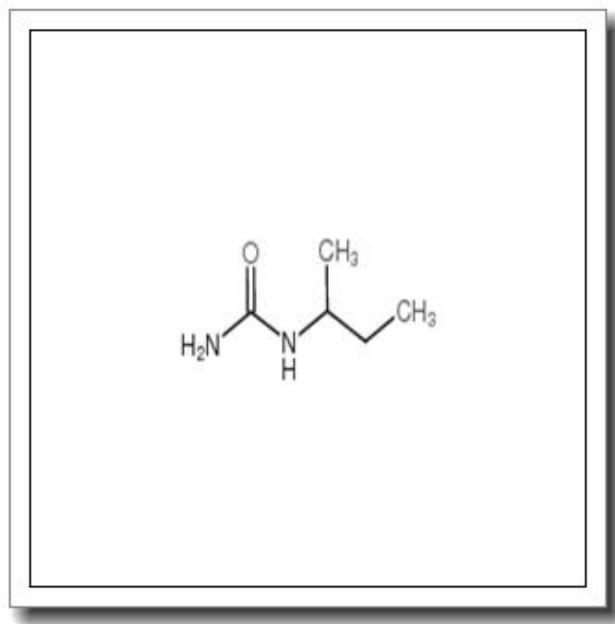


# 仲丁基脲

*N-sec-Butylurea*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	N-sec-Butylurea
中文名称	仲丁基脲
CAS 号	689-11-2
分子式	C <sub>5</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub> O
分子量	116.162
纯度	≥ 96%

## 产品说明

### N-sec-Butylurea (仲丁基脲) 产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

N-sec-Butylurea (CAS 号 689-11-2) 是一种有机脲类衍生物, 分子式为  $C_5H_{12}N_2O$ , 分子量 116.162。本品为白色至类白色结晶性粉末, 纯度  $\geq 96\%$ , 具有脲类化合物的典型特性, 包括良好的热稳定性和适度的水溶性。其结构中含有的仲丁基侧链赋予其独特的疏水性, 使其在有机合成和生物化学领域具有特定应用价值。

#### 2. 生物化学功能与重要性

仲丁基脲作为脲类化合物, 可通过氢键与生物分子 (如蛋白质或核酸) 相互作用, 在酶抑制研究和分子识别中发挥作用。其结构中的脲基团是药物设计中常见的药效团, 可用于修饰化合物亲脂性或优化生物利用度。此外, 该分子可作为中间体参与杂环化合物的合成, 在药物化学和材料科学中具有潜在价值。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于以下领域:

- 有机合成: 作为构建块用于制备含脲结构的复杂分子, 如杀虫剂或除草剂。
- 药物研发: 用于激酶抑制剂或 GPCR 调节剂的先导化合物优化。
- 材料科学: 作为添加剂调控高分子材料的结晶行为或机械性能。
- 分析化学: 在色谱分离中作为改性剂或参考标准品使用。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议储存于密闭容器中, 置于干燥、阴凉处 ( $2-8^{\circ}C$ ), 避免光照和潮湿环境。开封后需充惰性气体保护以延长保质期。使用时需佩戴防护手套和护目镜, 在通风良好的环境中操作。溶解性测试表明其易溶于极性有机溶剂 (如 DMF、DMSO), 水溶液需现配现用。

#### 5. 质量控制与安全信息

本品通过 HPLC 检测纯度  $\geq 96\%$ , 残留溶剂符合 ICH 标准。安全数据表明其急性毒性

较低（LD50 大鼠经口>2000 mg/kg），但仍可能引起眼睛和皮肤刺激。操作时应避免吸入粉尘，意外接触需用大量清水冲洗。废弃物处置需符合当地环保法规，建议采用焚烧法处理。

（注：本说明基于现有科学数据编制，具体应用需结合实验验证。产品规格可能因批次调整，请以随货 COA 为准。）