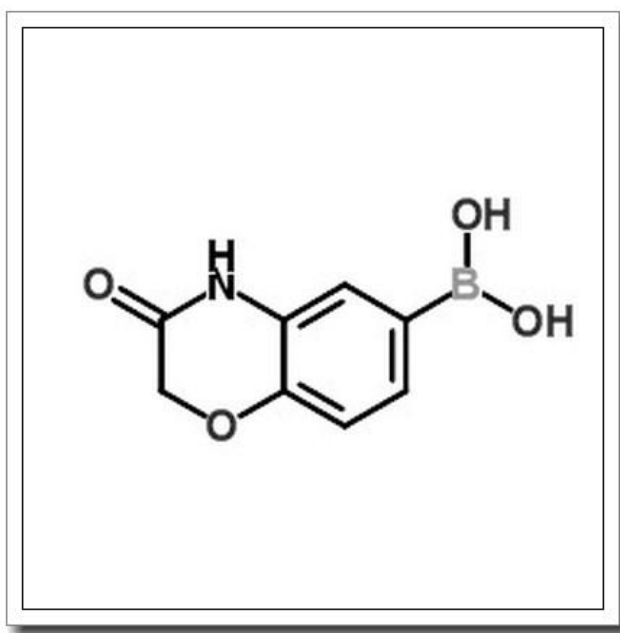


(3-氧代-3,4-二氢-2H-苯并[b][1,4]噁嗪-6-基)硼酸

(3-oxo-4H-1,4-benzoxazin-6-yl)boronic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	(3-oxo-4H-1,4-benzoxazin-6-yl)boronic acid
中文名称	(3-氧代-3,4-二氢-2H-苯并[b][1,4]噁嗪-6-基)硼酸
CAS 号	1246765-28-5
分子式	C ₈ H ₈ BN ₀ O ₄
分子量	192.964
纯度	>96%

产品说明

(3-氧代-3,4-二氢-2H-苯并[b][1,4]噁嗪-6-基)硼酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为高纯度有机硼酸衍生物，化学名称(3-oxo-4H-1,4-benzoxazin-6-yl)boronic acid, CAS 号 1246765-28-5, 分子式 C₈H₈BN₀O₄, 分子量 192.964。白色至类白色结晶粉末，纯度>96% (HPLC 验证)，可溶于二甲基亚砜 (DMSO) 和甲醇等极性有机溶剂，微溶于水。其结构中的苯并噁嗪环与硼酸基团赋予独特的电子效应，使其成为 Suzuki-Miyaura 偶联反应的高效底物。

2. 生物化学功能与重要性

作为硼酸类化合物，该分子可通过硼原子与生物分子中的羟基或氨基形成可逆共价键，在药物设计中被广泛用作蛋白酶抑制剂的构建模块。其苯并噁嗪骨架具有调控细胞信号通路的潜力，尤其在激酶抑制剂开发中表现突出。硼酸基团的缺电子特性使其能模拟酶过渡态结构，是开发抗肿瘤、抗炎靶向药物的关键药效团。

3. 主要应用领域与具体用途

- 3.1 医药研发：用于构建 EGFR、VEGFR 等酪氨酸激酶抑制剂的硼酸片段，优化药物代谢稳定性。
- 3.2 材料科学：作为有机发光二极管 (OLED) 中间体，参与共轭聚合物的合成。
- 3.3 化学合成：在钯催化交叉偶联反应中作为芳基供体，高效构建 C-C 键。
- 3.4 生物探针：标记糖蛋白或核酸，用于荧光成像和诊断试剂开发。

4. 储存条件与使用建议

- 4.1 储存：密封避光保存于-20° C 惰性气体 (如氩气) 环境中，湿度需控制在 40% 以下。
- 4.2 溶解：建议使用前以无水 DMSO 配制母液 (10-50 mM)，避免反复冻融。
- 4.3 操作：在通风橱中进行称量，接触时需佩戴丁腈手套及护目镜。

5. 质量控制与安全信息

- 5.1 质检标准：通过 HPLC、NMR (1H/13C) 和质谱进行结构确证，残留溶剂符合

ICH Q3C 标准。

5.2 安全数据：急性毒性（LD50 大鼠口服）>500 mg/kg，皮肤刺激类别 3，操作后需彻底清洗暴露部位。

5.3 废弃物处理：按危险有机废物处置，不可直接排入下水道。

本产品仅限科研用途，不适用于临床或食品领域。具体应用前请查阅最新文献并开展小试实验。