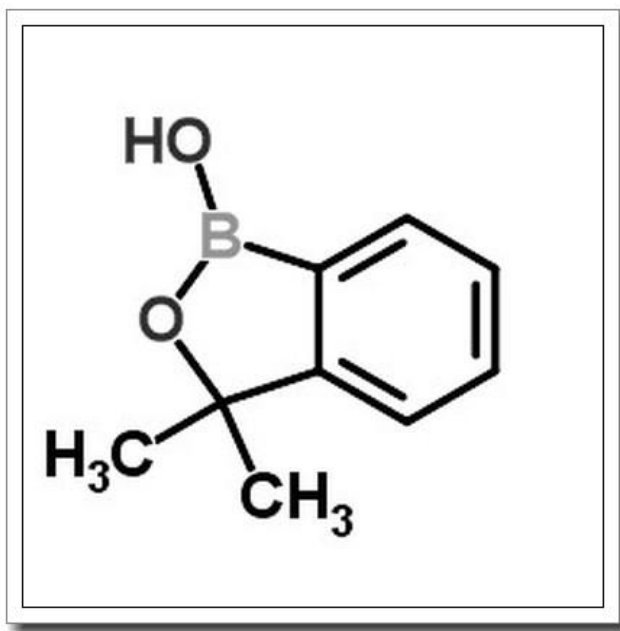


3,3-二甲基苯并[C][1,2]氧杂戊硼烷-1(3H)-醇

1-hydroxy-3,3-dimethyl-2,1-benzoxaborole



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-hydroxy-3,3-dimethyl-2,1-benzoxaborole
中文名称	3,3-二甲基苯并[C][1,2]氧杂戊硼烷-1(3H)-醇
CAS 号	221352-10-9
分子式	C ₉ H ₁₁ B ₀ O ₂
分子量	161.993
纯度	>96%

产品说明

1-羟基-3,3-二甲基-2,1-苯并氧杂硼烷产品说明书

产品概述与化学特性

本产品化学名称为 1-hydroxy-3,3-dimethyl-2,1-benzoxaborole (CAS 221352-10-9), 中文系统命名为 3,3-二甲基苯并[C][1,2]氧杂戊硼烷-1(3H)-醇, 分子式 C₉H₁₁B₀O₂, 分子量 161.993。该化合物为白色至类白色结晶粉末, 纯度 ≥96%, 属于苯并氧杂硼烷类衍生物, 其结构特征为苯环与含硼五元杂环稠合, 羟基取代基赋予其独特的配位能力。

生物化学功能与重要性

作为硼酸酯类化合物, 该分子可通过硼原子的空 p 轨道与生物分子中的羟基、氨基等基团形成可逆共价键, 表现出类过渡态抑制剂特性。其结构中的刚性苯环骨架增强了靶标结合特异性, 在酶抑制和分子探针领域具有重要价值。特别值得注意的是, 该类结构在抗菌、抗炎药物研发中显示出调控 β-内酰胺酶活性的潜力。

主要应用领域与具体用途

1. 医药研发: 作为先导化合物用于设计新型抗菌剂, 尤其针对革兰氏阴性菌的硼酸类抗生素开发
2. 材料科学: 有机硼荧光材料的合成前体
3. 化学生物学: 蛋白质标记和活性位点探针的构建模块
4. 农业化学: 植物病原体抑制剂的中间体

储存条件与使用建议

储存于-20℃惰性气体保护环境中, 避免光照与湿度。开封后建议充氩气保存, 使用前需在干燥箱中平衡至室温。溶解性测试表明, 该化合物在 DMSO 中溶解度 >50 mg/mL, 甲醇中约 30 mg/mL, 水溶液中易水解, 建议现配现用。实验操作需在通风橱中进行。

质量控制与安全信息

通过 HPLC (C18 柱, 甲醇/水梯度洗脱) 检测纯度, 批间差异 <2%。核磁共振 (1H

NMR) 确保结构正确性。根据 GHS 分类, 该产品可能导致皮肤刺激 (类别 2) 和严重眼损伤 (类别 1), 操作时应佩戴护目镜和丁腈手套。废弃物需按危险化学品处理规范处置。

本产品仅供科研用途, 不适用于诊断或治疗用途。具体应用前请查阅最新文献并开展预实验验证。