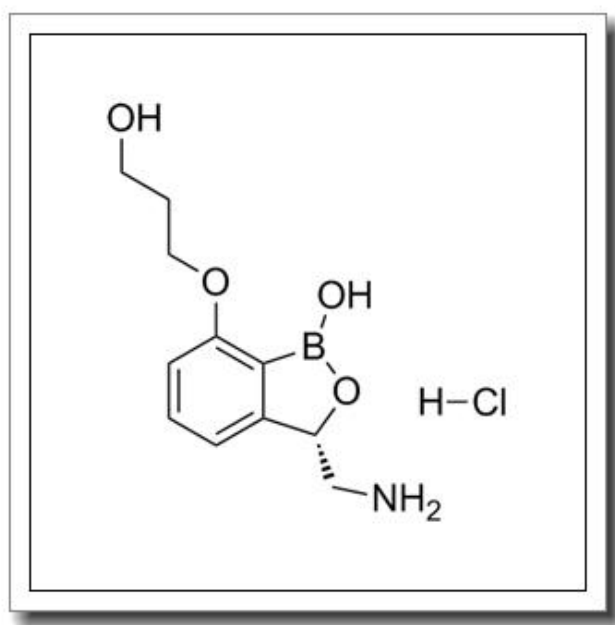


3-[[(3S)-3-(氨基甲基)-1,3-二氢-1-羟基-2,1-苯并氧杂硼戊环-7-基]氧基]-1-丙醇盐酸盐

(3S)-3-(Aminomethyl)-7-(3-hydroxypropoxy)-2,1-benzoxaborol-1(3H)-ol hydrochloride (1:1)



产品基本信息

属性	值
化学名称	(3S)-3-(Aminomethyl)-7-(3-hydroxypropoxy)-2,1-benzoxaborol-1(3H)-ol hydrochloride (1:1)
中文名称	3-[[(3S)-3-(氨基甲基)-1,3-二氢-1-羟基-2,1-苯并氧杂硼戊环-7-基]氧基]-1-丙醇盐酸盐
CAS 号	1234563-16-6
分子式	C11H17BC1N04
分子量	273.521
纯度	≥96%

产品说明

3-[[(3S)-3-(氨基甲基)-1,3-二氢-1-羟基-2,1-苯并氧杂硼戊环-7-基]氧基]-1-丙醇盐酸盐产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为(3S)-3-(Aminomethyl)-7-(3-hydroxypropoxy)-2,1-benzoxaborol-1(3H)-ol hydrochloride (1:1)，分子式 C₁₁H₁₇BClN₀₄，分子量 273.521，CAS 号 1234563-16-6。其结构中含苯并氧杂硼戊环核心与氨基甲基、羟丙氧基等活性基团，盐酸盐形式提高了水溶性与稳定性。纯度 ≥96% (HPLC)，需避光防潮保存。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物属于苯并硼唑类衍生物，具有独特的硼原子杂环结构，可通过可逆共价键与生物分子中的羟基或羧基结合。其氨基甲基增强细胞膜穿透性，羟丙氧基链优化亲水-疏水平衡，在抑制酶活性（如 β-内酰胺酶）和病原体生长中表现显著，是开发抗菌、抗炎药物的关键中间体。

3. 主要应用领域与具体用途

作为高价值医药中间体，主要用于以下领域：

- 新型抗生素研发：作为硼酸类抗菌剂的前体，靶向耐药性细菌的细胞壁合成酶。
- 抗真菌药物开发：通过干扰真菌麦角固醇合成途径发挥作用。
- 生化研究工具：用于研究硼酸基团与生物靶点的相互作用机制。

4. 储存条件与使用建议

储存于 2-8°C 干燥环境中，密封避光，保质期 24 个月。使用时需在惰性气体（如氮气）保护下操作，避免反复冻融。建议溶解于 pH 6.0-7.5 的缓冲液，浓度不超过 10 mM 以防自聚。

5. 质量控制与安全信息

经 HPLC、NMR 及质谱严格验证，残留溶剂符合 ICH 标准。安全数据：

- 危害标识：H315-H319（皮肤/眼刺激）

- 防护措施: 佩戴护目镜与丁腈手套, 在通风橱中操作。
- 急救措施: 接触皮肤后立即用肥皂水冲洗, 误食需就医。

本产品仅限科研用途, 不适用于临床或食品领域。具体实验方案建议参考文献或咨询专业技术支持。