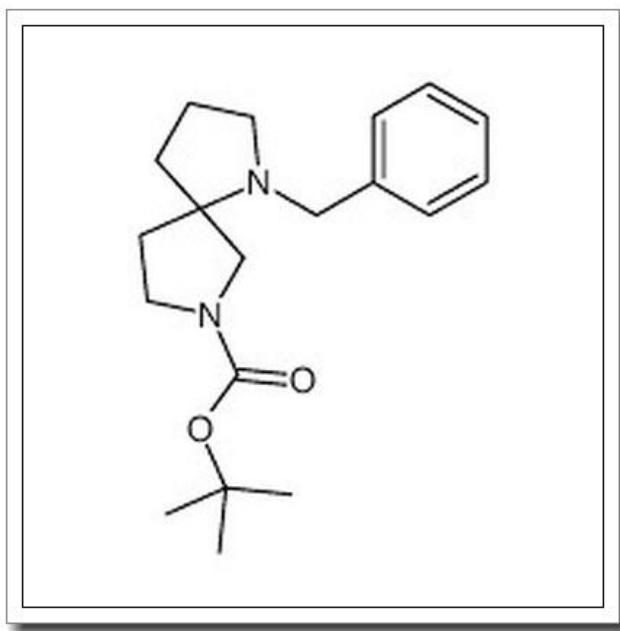


1-苄基-1,7-二氮杂螺[4.4]壬烷-7-羧酸叔丁酯

2-Methyl-2-propanyl 1-benzyl-1,7-diazaspiro[4.4]nonane-7-carboxyl ate



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-Methyl-2-propanyl 1-benzyl-1,7-diazaspiro[4.4]nonane-7-carboxyl ate
中文名称	1-苄基-1,7-二氮杂螺[4.4]壬烷-7-羧酸叔丁酯
CAS 号	646055-62-1
分子式	C ₁₉ H ₂₈ N ₂ O ₂
分子量	316.438
纯度	>96%

产品说明

1-苄基-1,7-二氮杂螺[4.4]壬烷-7-羧酸叔丁酯产品说明书

产品概述与化学特性

本产品化学名称为 2-Methyl-2-propanyl 1-benzyl-1,7-diazaspiro[4.4]nonane-7-carboxylate, 是一种高纯度有机化合物, CAS 号为 646055-62-1。其分子式为 C₁₉H₂₈N₂O₂, 分子量为 316.438, 常温下呈白色至类白色结晶或粉末状。该化合物属于螺环二氮杂衍生物, 具有独特的刚性螺环结构和叔丁酯保护基团, 纯度经 HPLC 验证大于 96%。其疏水性和空间位阻特性使其在有机合成中表现出优异的反应选择性。

生物化学功能与重要性

作为杂环化合物的重要中间体, 该分子中的螺环结构和氮原子使其能够与多种生物靶点相互作用。其叔丁酯基团在酸性条件下可选择性脱保护, 释放活性羧基, 适用于肽类化合物和药物分子的片段合成。在药物化学领域, 此类结构常作为蛋白酶抑制剂或受体调节剂的核心骨架, 尤其在神经科学和抗肿瘤药物研发中具有潜在应用价值。

主要应用领域与具体用途

1. 医药研发: 用于构建小分子药物库, 特别是针对 GPCR 靶点的化合物优化。
2. 有机合成: 作为手性合成子参与不对称催化反应, 或用于构建复杂杂环体系。
3. 生化探针: 经衍生化后可开发为荧光标记物或光亲和标记探针。
4. 材料科学: 作为功能单体参与高分子材料的改性研究。

储存条件与使用建议

本品需避光密封保存于-20℃干燥环境中, 有效期 24 个月。开封后建议充氮保护并尽快使用。溶解性测试显示易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂, 微溶于甲醇, 水溶性差。实验操作应在通风橱中进行, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。

质量控制与安全信息

批次质检报告包含 HPLC 纯度分析、NMR 结构确证及水分含量测定。安全数据表明

该化合物对眼睛和呼吸道有轻微刺激性，操作时应佩戴护目镜和防尘口罩。废弃物需按危险化学品处理规范处置。急性毒性数据（LD50）尚未完全建立，建议遵循实验室常规防护措施。

（注：实际应用前请查阅最新版物质安全数据表 MSDS 并开展小试验证）