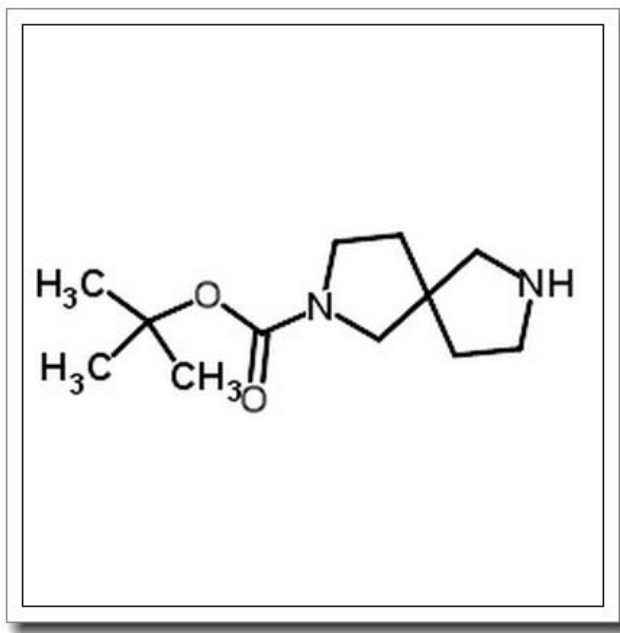


2-BOC-2,7-二氮杂-螺[4.4]壬烷

2,7-Diazaspiro[4.4]nonane-2-carboxylic acid tert-butyl ester



产品基本信息

属性	值
化学名称	2,7-Diazaspiro[4.4]nonane-2-carboxylic acid tert-butyl ester
中文名称	2-BOC-2,7-二氮杂-螺[4.4]壬烷
CAS 号	236406-49-8
分子式	C ₁₂ H ₂₂ N ₂ O ₂
分子量	226.315
纯度	>96%

产品说明

2,7-二氮杂螺[4.4]壬烷-2-羧酸叔丁酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 2,7-Diazaspiro[4.4]nonane-2-carboxylic acid tert-butyl ester (CAS 236406-49-8)，是一种含螺环结构的氮杂化合物，分子式为 $C_{12}H_{22}N_2O_2$ ，分子量 226.315。其结构特征为刚性螺[4.4]壬烷骨架与叔丁氧羰基 (BOC) 保护基团，赋予其优异的立体选择性和化学稳定性。常温下呈白色至类白色结晶粉末，纯度 $\geq 96\%$ (HPLC)，易溶于有机溶剂如二氯甲烷、DMF，微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为哌嗪类衍生物，该化合物是构建复杂生物活性分子的关键中间体。其螺环结构可限制分子构象自由度，增强与靶标蛋白的结合特异性；BOC 保护基团在肽类合成中提供氨基保护功能，同时耐受多种反应条件（如碱性环境、亲核试剂）。在药物化学中，此类结构单元常用于开发神经调节剂、GPCR 靶向药物及酶抑制剂。

3. 主要应用领域与具体用途

(1) 药物研发：用于合成小分子抑制剂（如激酶抑制剂）、抗抑郁药物前体及镇痛剂结构修饰。

(2) 肽类合成：作为 BOC 保护的氨基组分，参与固相肽合成 (SPPS) 中的片段缩合。

(3) 材料科学：修饰高分子材料以引入功能性氮杂环结构，改善材料生物相容性。

4. 储存条件与使用建议

储存于密封、避光容器中，温度控制在 $-20^{\circ}C$ 至 $4^{\circ}C$ （长期储存推荐 $-20^{\circ}C$ ）。开封后需充惰性气体（如氮气）保护，避免吸湿降解。使用前建议室温平衡 30 分钟，称量环境湿度需低于 60%。溶解时优先选用无水 DMF 或 THF，若需水相反应，建议先以有机溶剂预溶后缓慢加入缓冲体系。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC、NMR 及质谱三重验证，残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。操作时需佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩，避免吸入或皮肤接触。如意外接触眼睛，立即用大量清水冲洗并就医。化学废弃物处置需遵守当地法规，不可直接排入下水道。安全数据表（SDS）备索，含详细毒理学数据（LD50 > 2000 mg/kg，大鼠口服）。

注：本说明基于现有研究数据编制，具体应用需结合实验条件优化。