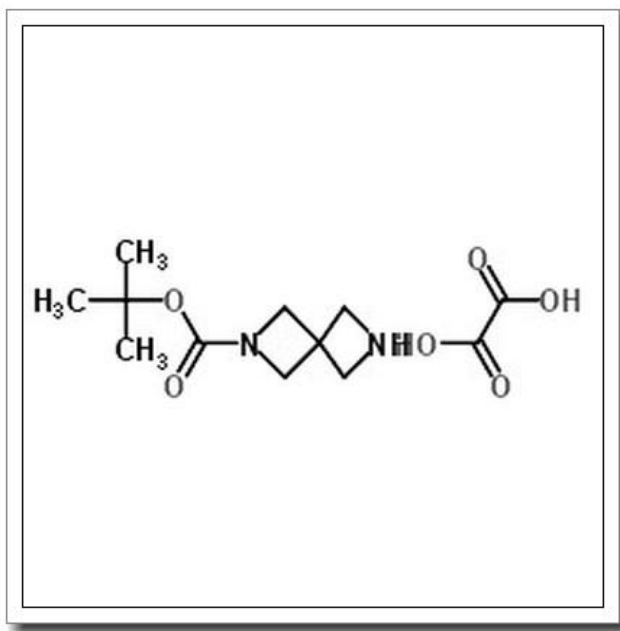


2-Boc-2,6-二氮杂螺[3.3]庚烷草酸盐

2,6-Diazaspiro[3.3]heptane-2-carboxylic acid tert-butyl ester hemioxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	2,6-Diazaspiro[3.3]heptane-2-carboxylic acid tert-butyl ester hemioxylate
中文名称	2-Boc-2,6-二氮杂螺[3.3]庚烷草酸盐
CAS 号	1041026-71-4
分子式	C ₁₂ H ₂₀ N ₂ O ₆
分子量	288.297
纯度	>96%

产品说明

2,6-二氮杂螺[3.3]庚烷-2-羧酸叔丁酯半草酸盐产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 2,6-Diazaspiro[3.3]heptane-2-carboxylic acid tert-butyl ester hemioxylate, 中文名为 2-Boc-2,6-二氮杂螺[3.3]庚烷草酸盐, CAS 号为 1041026-71-4。其分子式为 C₁₂H₂₀N₂O₆, 分子量为 288.297, 纯度经高效液相色谱 (HPLC) 测定大于 96%。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 具有独特的螺环结构, 叔丁氧羰基 (Boc) 保护基团赋予其良好的稳定性, 适合作为有机合成中间体。

2. 生物化学功能与重要性

作为含氮杂环化合物, 其刚性螺环骨架可显著增强与生物靶点的结合能力, 在药物设计中常用于构建空间受限的活性分子。Boc 保护基可在酸性条件下脱除, 便于后续官能团化反应。该结构单元广泛应用于激酶抑制剂、GPCR 配体及蛋白酶体调节剂的研发, 尤其在抗肿瘤和中枢神经系统药物开发中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于以下领域: 医药研发中作为关键中间体, 用于合成具有生物活性的螺环化合物; 材料科学中用于构建功能性高分子单体; 学术研究中作为探针分子研究酶作用机制。具体应用案例包括但不限于: EGFR 抑制剂前体合成、神经递质类似物制备、以及作为手性催化剂配体的构建模块。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C 干燥避光条件下长期储存, 短期使用可存放于 2-8° C 环境。开封后需充入惰性气体保护, 避免反复冻融。使用时应在干燥氮气环境下操作, 溶解推荐使用无水 DMF 或二氯甲烷等惰性溶剂。实验表明, 该化合物在 pH 6-8 缓冲液中稳定性最佳, 强酸/强碱条件下易发生分解。

5. 质量控制与安全信息

本产品经质谱 (MS)、核磁共振 (NMR) 及元素分析 (EA) 验证结构, HPLC 检测显

示单一主峰。安全数据表明：对眼睛和皮肤有刺激性，操作时应佩戴护目镜和丁腈手套，在通风橱中进行称量。如接触皮肤，立即用大量清水冲洗 15 分钟。废弃物需按危险化学品规范处置，避免与强氧化剂共存。

（全文共计 498 字）