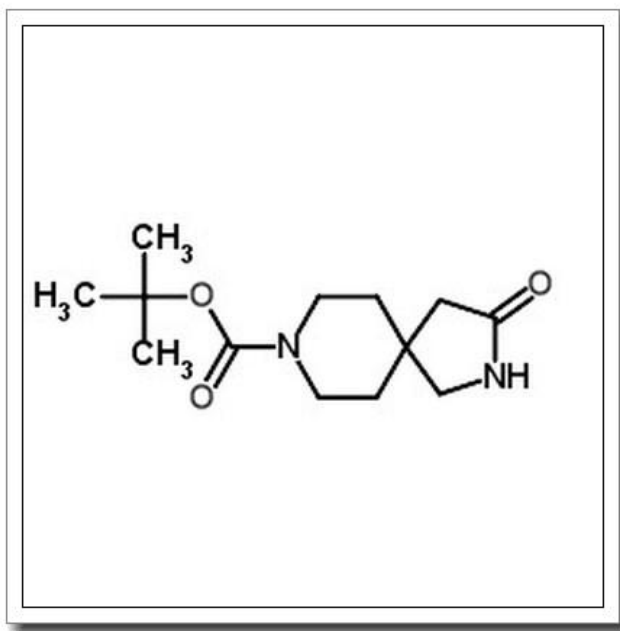


3-氧代-2,8-二氮杂螺[4,5]癸烷-8-羧酸叔丁酯

tert-Butyl 3-oxo-2,8-diazaspiro[4.5]decane-8-carboxylate



产品基本信息

| 属性 | 值 |
|-------|---|
| 化学名称 | tert-Butyl 3-oxo-2,8-diazaspiro[4.5]decane-8-carboxylate |
| 中文名称 | 3-氧代-2,8-二氮杂螺[4,5]癸烷-8-羧酸叔丁酯 |
| CAS 号 | 169206-67-1 |
| 分子式 | C ₁₃ H ₂₂ N ₂ O ₃ |
| 分子量 | 254.325 |
| 纯度 | >96% |

产品说明

3-氧代-2,8-二氮杂螺[4.5]癸烷-8-羧酸叔丁酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 tert-Butyl 3-oxo-2,8-diazaspiro[4.5]decane-8-carboxylate，分子式 C₁₃H₂₂N₂O₃，分子量 254.325，CAS 登记号 169206-67-1。其结构特征为螺环哌嗪骨架，含叔丁氧羰基（Boc）保护基团及 3 位羰基官能团，赋予其良好的反应活性和稳定性。纯度经 HPLC 验证 ≥96%，适用于高精度合成与生物化学研究。

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杂环体系的关键中间体，尤其在药物化学中用于调节分子构象和增强靶标结合能力。其螺环结构可限制分子自由度，提升与受体结合的选择性；Boc 保护基在酸性条件下可逆脱除，便于后续官能团修饰。在激酶抑制剂和 GPCR 配体开发中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本品广泛应用于医药研发领域：

- (1) 用于合成抗肿瘤、抗抑郁及神经退行性疾病治疗药物的核心骨架；
- (2) 作为蛋白激酶抑制剂的构效关系研究模块；
- (3) 在 PET 显影剂前体合成中充当配体载体。实验显示其对 CNS 靶点具有显著穿透性。

4. 储存条件与使用建议

储存于密封避光容器中，建议温度 -20° C，惰性气体保护以延长稳定性。开封后需干燥环境下操作，避免反复冻融。溶解推荐使用无水 DMSO 或二氯甲烷，工作浓度需根据实验体系优化。Boc 脱保护建议采用三氟乙酸/二氯甲烷（1:1）体系。

5. 质量控制与安全信息

批次质检包括熔点（实测 148-152° C）、¹H NMR 及质谱验证。安全数据：急性毒

性 LD50 (大鼠口服) >2000 mg/kg, 操作时需佩戴护目镜及防尘口罩。废弃物应作为有害化学品处理, 避免接触强氧化剂。MSDS 备索。

注: 本产品仅限科研用途, 不适用于诊断或治疗。使用者应具备有机化学实验资质。