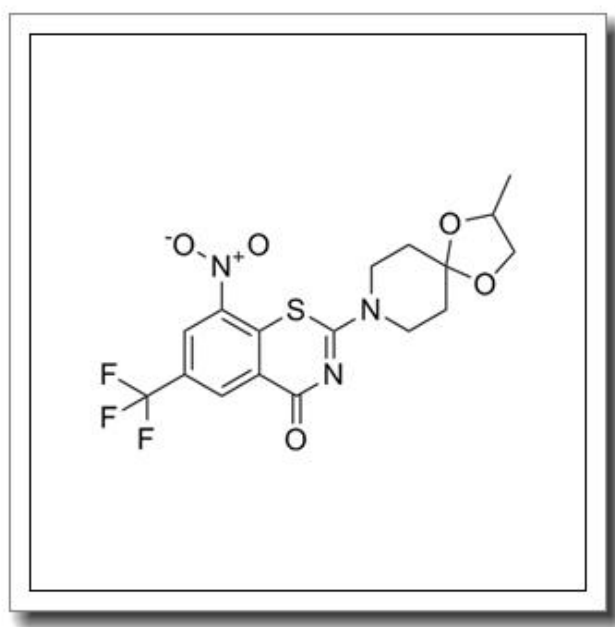


2-(2-甲基-1,4-二氧杂-8-氮杂螺[4.5]癸烷-8-基)-8-硝基-6-(三氟甲基)-4H-苯并[E][1,3]噻嗪-4-酮

2-(3-methyl-1,4-dioxo-8-azaspiro[4.5]decan-8-yl)-8-nitro-6-(trifluoromethyl)-1,3-benzothiazin-4-one



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-(3-methyl-1,4-dioxo-8-azaspiro[4.5]decan-8-yl)-8-nitro-6-(trifluoromethyl)-1,3-benzothiazin-4-one
中文名称	2-(2-甲基-1,4-二氧杂-8-氮杂螺[4.5]癸烷-8-基)-8-硝基-6-(三氟甲基)-4H-苯并[E][1,3]噻嗪-4-酮
CAS 号	957217-65-1
分子式	C17H16F3N3O5S
分子量	431.386

纯度	$\geq 96\%$
----	-------------

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为 2-(3-甲基-1,4-二氧杂-8-氮杂螺[4.5]癸烷-8-基)-8-硝基-6-(三氟甲基)-1,3-苯并噻嗪-4-酮, 化学式为 C₁₇H₁₆F₃N₃O₅S, 分子量 431.386, CAS 号为 957217-65-1。其结构包含螺环、硝基和三氟甲基等特征基团, 赋予其独特的化学稳定性和反应活性。纯度为 96% 以上, 外观通常为淡黄色至类白色结晶或粉末, 需通过核磁共振 (NMR) 和高效液相色谱 (HPLC) 验证结构及纯度。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物是一种苯并噻嗪酮衍生物, 其硝基和三氟甲基结构可能参与电子转移或氢键相互作用, 在生物体系中表现出潜在的酶抑制或信号调控活性。螺环部分可增强分子刚性, 可能影响其与靶标蛋白的结合特异性。此类结构在药物化学中常用于开发抗感染或抗肿瘤先导化合物。

3. 主要应用领域与具体用途

目前主要应用于医药研发领域, 作为关键中间体用于合成具有生物活性的小分子抑制剂。具体用途包括:

- 结核分枝杆菌抑制剂的研究, 可能与细菌细胞壁合成相关酶相互作用;
- 抗炎或抗增殖药物的结构优化, 通过修饰其苯并噻嗪酮核心;
- 化学探针开发, 用于研究硝基还原酶或氧化应激通路。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C 下避光密封保存, 长期储存需充惰性气体保护。使用时恢复至室温并干燥环境操作, 避免反复冻融。溶解性测试表明其在 DMSO 中溶解度较高 (>10 mg/mL), 水溶液中需加入助溶剂。实验操作需在通风橱中进行, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。

5. 质量控制与安全信息

批次质量控制包括 HPLC 纯度检测 (≥96%) 和质谱 (MS) 验证。该化合物可能对眼睛、皮肤及呼吸系统有刺激性, 操作时需佩戴防护手套、护目镜及口罩。安全数据

表（SDS）显示其急性毒性数据尚不完整，建议按潜在有害化学品处理。废弃物应归类为有机有害废物，由专业机构处置。