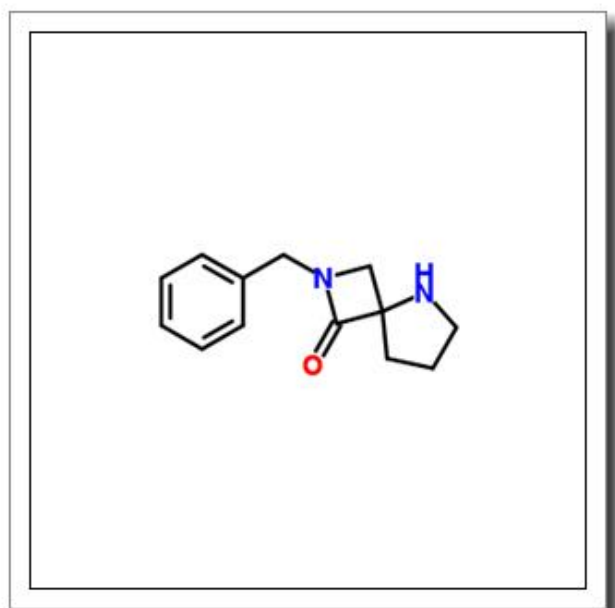


2-Benzyl-2,5-diazaspiro[3.4]octan-1-one

2-Benzyl-2, 5-diazaspiro[3. 4]octan-1-one



产品基本信息

| 属性 | 值 |
|-------|--|
| 化学名称 | 2-Benzyl-2, 5-diazaspiro[3. 4]octan-1-one |
| 中文名称 | 2-Benzyl-2, 5-diazaspiro[3. 4]octan-1-one |
| CAS 号 | 1415562-70-7 |
| 分子式 | C ₁₃ H ₁₆ N ₂ O |
| 分子量 | 216. 279 |
| 纯度 | ≥ 96% |

产品说明

2-Benzyl-2,5-diazaspiro[3.4]octan-1-one 产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 2-Benzyl-2,5-diazaspiro[3.4]octan-1-one, CAS 号为 1415562-70-7, 分子式为 C₁₃H₁₆N₂O, 分子量为 216.279。其结构特征为含苯甲基取代的螺环二氮杂酮骨架, 具有独特的空间构型和电子分布。常温下为白色至类白色结晶性粉末, 纯度 ≥96%, 可通过 HPLC 和 NMR 验证。该化合物在极性有机溶剂 (如 DMSO、甲醇) 中溶解性良好, 但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

作为螺环二氮杂酮类衍生物, 该分子因其刚性螺环结构和氮杂原子特性, 在药物化学中常作为关键中间体或药效团。其结构可参与氢键形成和 $\pi-\pi$ 堆积作用, 与生物靶点 (如酶或受体) 具有特异性结合潜力。在神经科学和肿瘤学研究领域, 类似结构已被报道具有调节神经递质或抑制细胞增殖的活性, 因此本产品在创新药物研发中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于医药研发和有机合成领域。具体用途包括: 1) 作为小分子抑制剂或激动剂的合成砌块, 用于构建具有生物活性的复杂杂环化合物; 2) 在神经退行性疾病或抗癌药物筛选中作为先导化合物优化模板; 3) 用于研究螺环体系对化合物代谢稳定性和膜穿透性的影响。实验表明, 其苯甲基修饰位点可进一步功能化以调节药理特性。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20°C、避光、干燥条件下长期储存, 短期使用可存放于 4°C 环境。开封后需充惰性气体保护以避免氧化。使用时需在干燥惰性气氛 (如氮气手套箱) 中操作, 推荐以 DMSO 配制母液 (浓度 ≤10 mM), 分装后 -80°C 保存以避免反复冻融。实验操作应佩戴防护手套及护目镜。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，批次间一致性通过质谱和核磁共振验证。安全数据表明，其急性毒性（LD50）尚未完全明确，操作时需遵循实验室化学品通用防护标准。MSDS 显示其对眼睛和皮肤有潜在刺激性，意外接触需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置应参照有机有害化学品规范，禁止直接排放至环境。

注：以上信息基于现有研究数据，具体应用需结合实验设计进一步验证。