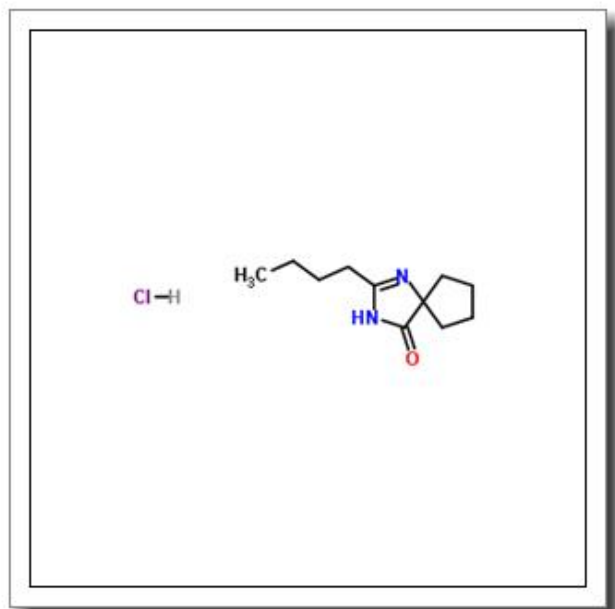


2-丁基-1,3-二氮杂螺环-[4,4]壬-1-烯-4-酮

2-butyl-1,3-diazaspiro[4.4]non-1-en-4-one



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-butyl-1,3-diazaspiro[4.4]non-1-en-4-one
中文名称	2-丁基-1,3-二氮杂螺环-[4,4]壬-1-烯-4-酮
CAS 号	138402-05-8
分子式	C ₁₁ H ₁₉ N ₂ O
分子量	230.734
纯度	≥96%

产品说明

2-丁基-1,3-二氮杂螺环-[4,4]壬-1-烯-4 酮产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 2-butyl-1,3-diazaspiro[4.4]non-1-en-4-one (CAS 号 138402-05-8), 是一种含氮螺环化合物, 分子式为 $C_{11}H_{19}N_2O$, 分子量 230.734。其结构特征为丁基取代的 1,3-二氮杂螺环骨架与烯酮官能团的结合, 赋予其独特的化学稳定性和反应活性。产品纯度 $\geq 96\%$, 常温下呈白色至类白色结晶或粉末状, 需避光保存。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为杂环衍生物, 其螺环结构可增强分子刚性, 在药物化学中常用于构建靶向蛋白结合位点的药效团。烯酮基团具有亲电性, 可参与迈克尔加成等关键反应, 而氮原子的存在使其具备配位能力和碱性, 在酶抑制或信号通路调控中具有潜在应用价值。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药中间体合成, 特别适用于开发抗肿瘤、抗感染类小分子抑制剂。在材料科学领域, 可作为功能化聚合物的单体或交联剂。实验室研究中常用于探索螺环化合物构效关系, 或作为荧光探针的骨架结构修饰原料。

4. 储存条件与使用建议

储存于 -20°C 至 4°C 惰性气体 (如氩气) 保护的密闭容器中, 避免与氧化剂、强酸强碱接触。使用前需恢复至室温并干燥处理, 建议在手套箱或通风橱中操作。溶解性测试表明其易溶于二甲基亚砜 (DMSO)、二氯甲烷, 微溶于醇类溶剂。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC、NMR 及质谱进行批次质量控制, 残留溶剂符合 ICH 标准。安全数据表明该物质可能引起眼睛和皮肤刺激, 操作时应佩戴护目镜、防化手套, 接触后立即用大量清水冲洗。废弃物需按危险化学品规范处置。

(注: 本说明基于现有研究数据, 具体应用需进一步实验验证。产品规格可能因批次调整, 请以随附分析证书为准。)