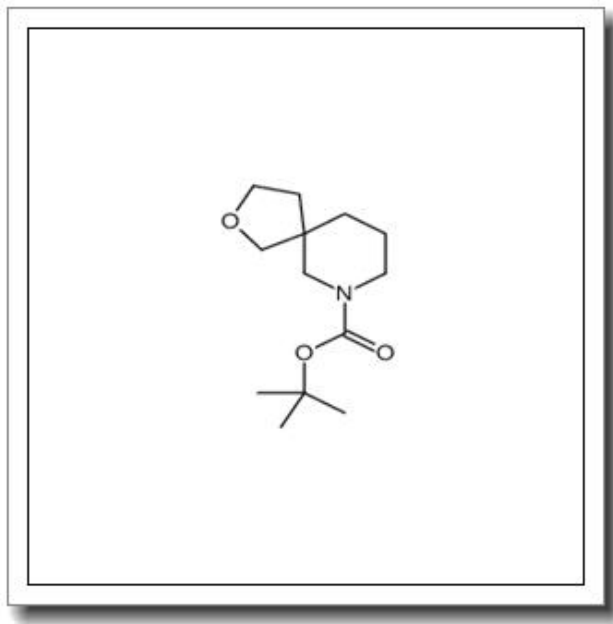


2-噁-7-氮杂螺[4.5]癸烷-7-羧酸叔丁酯

2-Methyl-2-propanyl 2-oxa-7-azaspiro[4.5]decane-7-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-Methyl-2-propanyl 2-oxa-7-azaspiro[4.5]decane-7-carboxylate
中文名称	2-噁-7-氮杂螺[4.5]癸烷-7-羧酸叔丁酯
CAS 号	374795-36-5
分子式	C ₁₃ H ₂₃ N ₁ O ₃
分子量	241.327
纯度	≥96%

产品说明

2-噁-7-氮杂螺[4.5]癸烷-7-羧酸叔丁酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 2-Methyl-2-propanyl 2-oxa-7-azaspiro[4.5]decane-7-carboxylate, 是一种含氮杂环螺环化合物, CAS 号为 374795-36-5。其分子式为 $C_{13}H_{23}NO_3$, 分子量为 241.327, 纯度 $\geq 96\%$ 。该化合物结构独特, 兼具螺环骨架和叔丁酯基团, 表现出良好的立体位阻效应和化学稳定性, 常温下为白色至类白色固体, 易溶于有机溶剂如二氯甲烷、THF 和 DMF。

2. 生物化学功能与重要性

作为螺环哌啶类衍生物, 该化合物是药物化学中重要的中间体, 尤其用于构建具有生物活性的含氮杂环结构。其叔丁酯基团可作为保护基团, 在肽类合成和杂环化合物修饰中发挥关键作用。此外, 螺环结构能增强分子刚性, 常用于优化候选药物的代谢稳定性和靶标结合能力。

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。在药物设计中, 它是合成蛋白酶抑制剂、GPCR 配体及神经活性分子的关键砌块。具体用途包括: 1) 作为 HIV 蛋白酶抑制剂的中间体; 2) 用于构建镇痛或抗抑郁药物的螺环哌啶核心; 3) 在不对称催化反应中作为手性辅助剂。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 下避光密封保存, 长期储存需充入惰性气体 (如氮气)。使用前需恢复至室温并干燥处理, 避免接触水分以防叔丁酯水解。实验操作应在通风橱中进行, 建议使用丁腈手套和护目镜。溶解性测试表明, 推荐使用无水 DMF 或 THF 作为反应溶剂。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, MS 和 NMR 谱图验证结构。安全数据表明, 其急性毒性 (LD50) 为 500 mg/kg (大鼠口服), 属于刺激性化学品。避免吸入粉尘或接

触皮肤，如不慎接触需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理应遵循当地法规，不可直接排放至环境中。

注：以上信息基于现有实验数据，实际应用前请查阅最新文献并开展小试验证。