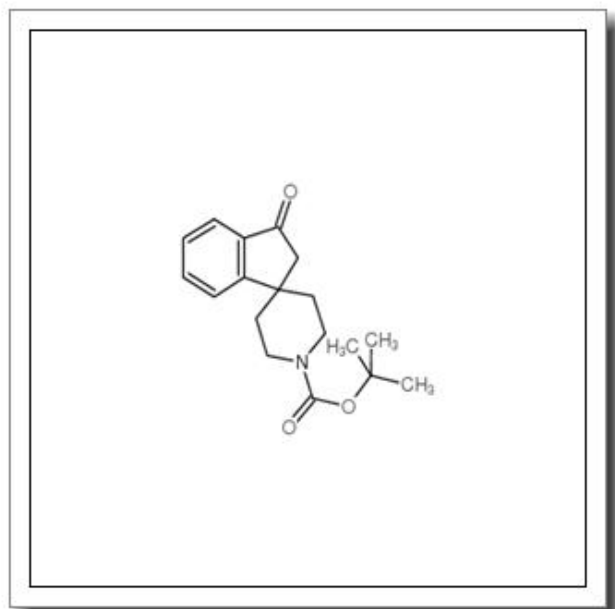


2,3-二氢-3-氧代螺[1H-茛-1,4'-哌啶]-1'- 甲酸叔丁酯

tert-Butyl 3-oxo-2,3-dihydrospiro[indene-1,4'-piperidine]-1'-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	<i>tert-Butyl 3-oxo-2,3-dihydrospiro[indene-1,4'-piperidine]-1'-carboxylate</i>
中文名称	2,3-二氢-3-氧代螺[1H-茛-1,4'-哌啶]-1'-甲酸叔丁酯
CAS 号	159634-59-0
分子式	C ₁₈ H ₂₃ N ₁ O ₃
分子量	301.38
纯度	≥96%

产品说明

2,3-二氢-3-氧代螺[1H-茛-1,4'-哌啶]-1'-甲酸叔丁酯 (tert-Butyl 3-oxo-2,3-dihydrospiro[indene-1,4'-piperidine]-1'-carboxylate) 是一种具有重要生物活性的有机化合物, CAS 号为 159634-59-0, 分子式为 C₁₈H₂₃N₃O₃, 分子量为 301.38。该化合物为白色至类白色结晶或粉末, 纯度通常不低于 96%, 具有较高的化学稳定性和良好的溶解性, 可溶于多种有机溶剂如二甲基亚砜 (DMSO)、甲醇和氯仿。

1. 产品概述与化学特性

该化合物属于螺环结构衍生物, 其分子结构包含茛酮和哌啶环, 并通过叔丁氧羰基 (Boc) 保护基修饰。这种独特的结构使其在药物化学和有机合成中具有广泛的应用价值。其熔点和沸点数据需根据实验条件测定, 建议在使用前通过核磁共振 (NMR) 或高效液相色谱 (HPLC) 进一步验证纯度。

2. 生物化学功能与重要性

2,3-二氢-3-氧代螺[1H-茛-1,4'-哌啶]-1'-甲酸叔丁酯是多种生物活性分子的关键中间体, 尤其在神经递质调节剂和酶抑制剂的合成中发挥重要作用。其螺环结构能够增强与靶标蛋白的结合能力, 因此在药物研发中常用于优化先导化合物的药理学和药代动力学性质。

3. 主要应用领域与具体用途

该化合物主要用于医药研发领域, 特别是在中枢神经系统 (CNS) 药物和抗炎药物的合成中。具体用途包括:

- 作为激酶抑制剂或 G 蛋白偶联受体 (GPCR) 调节剂的合成中间体;
- 用于构建具有螺环结构的杂环化合物库;
- 在不对称催化反应中作为手性配体或底物。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C 下避光保存, 长期储存需置于惰性气体 (如氮气) 环境中以延缓氧

化。使用时需在干燥条件下操作，避免接触水分。溶解时建议使用无水溶剂，并在通风橱中佩戴防护手套和护目镜。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和质谱 (MS) 严格质量控制，确保纯度 $\geq 96\%$ 。安全信息如下：

- 可能对眼睛、皮肤和呼吸道有刺激性，操作时需穿戴适当防护装备；
- 避免吸入粉尘或接触皮肤，如不慎接触，立即用大量清水冲洗并就医；
- 废弃物需按危险化学品处理规范处置。

以上信息仅供参考，具体实验条件请根据实际需求调整。如需进一步技术支持，请联系专业化学供应商或研发团队。