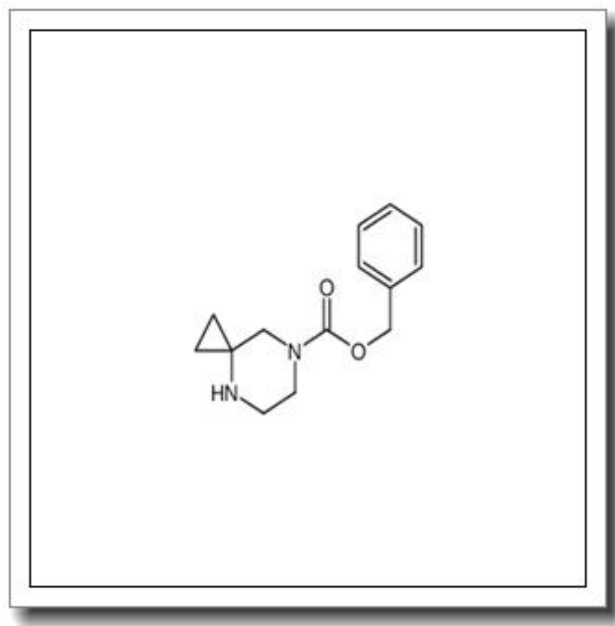


4,7-二氮杂螺[2.5]辛烷-7-羧酸苄酯

Benzyl 4,7-diazaspiro[2.5]octane-7-carboxylate



产品基本信息

| 属性 | 值 |
|-------|---|
| 化学名称 | Benzyl 4,7-diazaspiro[2.5]octane-7-carboxylate |
| 中文名称 | 4,7-二氮杂螺[2.5]辛烷-7-羧酸苄酯 |
| CAS 号 | 954240-30-3 |
| 分子式 | C ₁₄ H ₁₈ N ₂ O ₂ |
| 分子量 | 246.305 |
| 纯度 | ≥96% |

产品说明

4,7-二氮杂螺[2.5]辛烷-7-羧酸苄酯 (Benzyl 4,7-diazaspiro[2.5]octane-7-carboxylate) 是一种具有独特螺环结构的有机化合物, 其化学式为 $C_{14}H_{18}N_2O_2$, 分子量为 246.305。该化合物 CAS 号为 954240-30-3, 纯度通常不低于 96%。其结构中的二氮杂螺环和苄酯基团赋予其特殊的化学性质, 使其在有机合成和药物化学中具有重要价值。

1. 产品概述与化学特性

该化合物为白色至类白色结晶或粉末, 可溶于常见有机溶剂如二甲基亚砜 (DMSO)、甲醇和氯仿, 但在水中溶解度较低。其螺环结构具有较高的刚性, 能够稳定特定构象, 这对于设计具有特定生物活性的分子尤为重要。苄酯基团的存在使其易于通过氢化反应脱保护, 转化为相应的羧酸衍生物。

2. 生物化学功能与重要性

4,7-二氮杂螺[2.5]辛烷-7-羧酸苄酯作为一种重要的中间体, 广泛应用于药物研发领域。其螺环结构能够模拟天然产物的构象, 常用于构建酶抑制剂或受体调节剂的核心骨架。此外, 该化合物还可用于合成具有抗肿瘤、抗炎或神经活性潜力的先导化合物。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药化学中, 该化合物主要用于以下方向: 作为激酶抑制剂的关键片段, 用于构建小分子药物库; 在肽类模拟物设计中作为构象限制元件; 作为有机合成中的手性辅助剂或保护基团。其具体应用案例包括但不限于抗癌药物候选分子的合成和中枢神经系统药物的开发。

4. 储存条件与使用建议

建议将本品密封保存于 2-8°C 的干燥环境中, 避免光照和潮湿。开封后应尽快使用, 或充入惰性气体保护。使用时应在通风良好的环境下操作, 避免直接接触皮肤和眼睛。建议使用适当的个人防护装备, 包括实验服、手套和护目镜。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测确保纯度 $\geq 96\%$ ，并严格控制相关杂质含量。安全数据表明，该化合物可能对眼睛和皮肤有刺激性，操作时应采取适当防护措施。如不慎接触，应立即用大量清水冲洗并寻求医疗帮助。废弃物应按照当地法规作为危险化学品处理。详细的毒理学数据和生态影响可参考产品安全技术说明书（MSDS）。