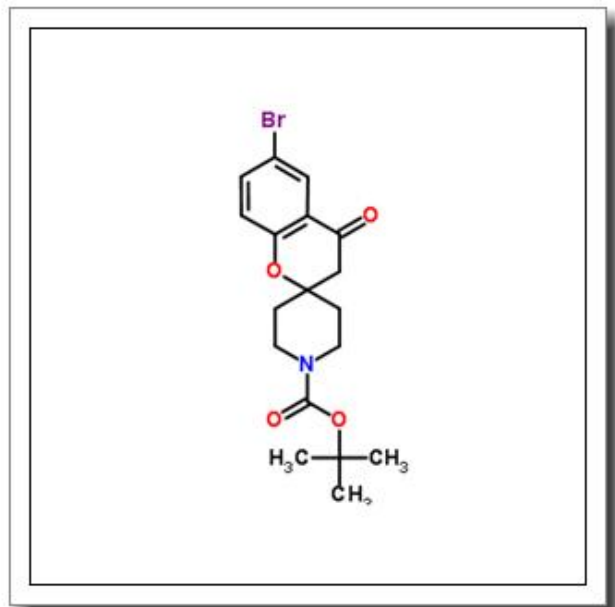


6-溴-4-氧代螺[苯并二氢吡喃-2,4-哌啶]-1-羧酸叔丁酯

tert-Butyl 6-bromo-4-oxospiro[chroman-2,4'-piperidine]-1'-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	<i>tert-Butyl 6-bromo-4-oxospiro[chroman-2,4'-piperidine]-1'-carboxylate</i>
中文名称	6-溴-4-氧代螺[苯并二氢吡喃-2,4-哌啶]-1-羧酸叔丁酯
CAS 号	690632-38-3
分子式	C ₁₈ H ₂₂ BrN ₀₄
分子量	396.276
纯度	≥96%

产品说明

6-溴-4-氧代螺[苯并二氢吡喃-2,4-哌啶]-1-羧酸叔丁酯 (tert-Butyl 6-bromo-4-oxospiro[chroman-2,4'-piperidine]-1'-carboxylate) 是一种重要的有机中间体, CAS 号为 690632-38-3, 分子式为 C₁₈H₂₂BrN₂O₄, 分子量为 396.276。该化合物为白色至类白色固体, 纯度不低于 96%, 具有螺环结构和溴取代基, 化学性质稳定, 适用于多种有机合成反应。

1. 产品概述与化学特性

该化合物属于螺环类衍生物, 其结构包含苯并二氢吡喃骨架与哌啶环的螺环连接, 同时带有溴原子和叔丁氧羰基 (Boc) 保护基。溴原子的引入使其具有良好的反应活性, 可用于进一步的偶联或取代反应。Boc 基团的存在则便于在合成过程中保护氨基, 并在需要时通过酸解脱除。

2. 生物化学功能与重要性

作为医药中间体, 该化合物在药物研发中具有重要价值, 尤其用于构建含螺环结构的活性分子。其结构特征使其成为激酶抑制剂、GPCR 调节剂等靶向药物设计的关键砌块。此外, 溴原子的定位修饰能力为结构多样性衍生提供了便利。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于医药和农药领域的创新分子合成。在药物化学中, 常用于抗肿瘤、抗炎或中枢神经系统药物的研发; 在农药化学中, 可作为高效低毒农药的中间体。具体用途包括 Suzuki 偶联、Buchwald-Hartwig 胺化等交叉偶联反应, 以及作为骨架结构参与多步合成。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C 下避光干燥储存, 长期保存需充惰性气体保护。使用前恢复至室温并避免反复冻融。操作时需在通风橱中进行, 佩戴防护手套和护目镜。溶解性测试表明, 该化合物易溶于二氯甲烷、DMF 等有机溶剂, 微溶于水。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测, 纯度 ≥96%, 并提供 COA (质量分析证书)。安全信息方

面，该化合物可能对眼睛、皮肤和呼吸系统造成刺激，需避免直接接触。如不慎接触，应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置需符合当地环保法规，不可随意丢弃。

以上信息仅供参考，具体实验方案需结合文献和实际需求优化。