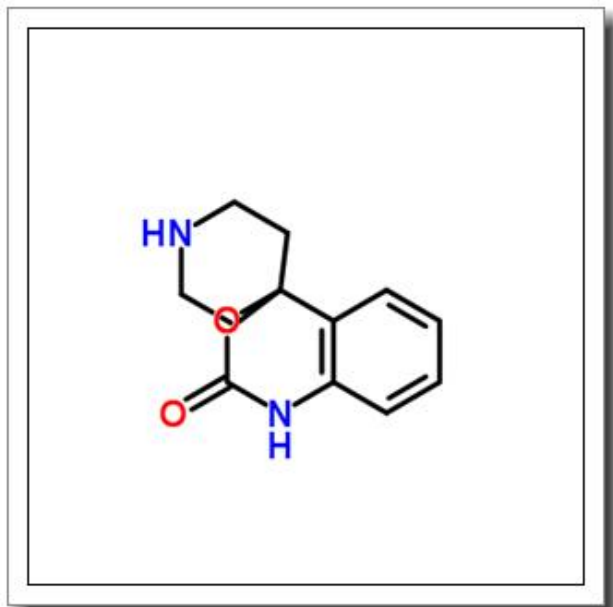


螺[4H-3,1-苯并噁嗪-4,4'-哌啶]-2(1H)- 酮

Spiro[4H-3,1-benzoxazine-4,4'-piperidin]-2(1H)-one



产品基本信息

属性	值
化学名称	Spiro[4H-3,1-benzoxazine-4,4'-piperidin]-2(1H)-one
中文名称	螺[4H-3,1-苯并噁嗪-4,4'-哌啶]-2(1H)-酮
CAS 号	84060-09-3
分子式	C ₁₂ H ₁₄ N ₂ O ₂
分子量	218.252
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

螺[4H-3,1-苯并噁嗪-4,4'-哌啶]-2(1H)-酮 (CAS 号: 84060-09-3) 是一种具有独特螺环结构的有机化合物, 分子式为 C₁₂H₁₄N₂O₂, 分子量为 218.252。该化合物以白色至类白色结晶粉末形式存在, 纯度不低于 96%。其结构中的苯并噁嗪与哌啶环通过螺碳原子连接, 赋予其特殊的化学稳定性和反应活性。该产品易溶于极性有机溶剂 (如 DMSO、甲醇), 但在水中溶解度较低, 需注意其酸碱稳定性以避免分解。

2. 生物化学功能与重要性

作为杂环化合物, 该分子在药物化学和材料科学中具有重要价值。其螺环结构可作为药效团的核心骨架, 常用于设计神经调节剂或酶抑制剂。苯并噁嗪片段提供电子富集特性, 而哌啶环则增强分子的脂溶性, 使其具备穿透生物膜的能力。在生物活性研究中, 类似结构化合物已显示出抗焦虑、抗抑郁等潜在药理活性, 因此该产品是开发中枢神经系统药物的关键中间体。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要应用于医药研发领域, 具体用途包括: 1) 作为新型精神类药物合成的中间体; 2) 用于构建多靶点配体的核心结构; 3) 在材料科学中作为功能化聚合物的单体。在有机合成中, 其螺环结构可作为手性诱导剂, 用于不对称催化反应。此外, 还可用于荧光探针分子的设计, 因其刚性结构能有效减少分子内旋转导致的荧光淬灭。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20°C、避光、干燥条件下长期储存, 短期使用可存放于 2-8°C 环境。开封后需充入惰性气体 (如氮气) 保护, 并密封保存于原装容器中。使用前需恢复至室温并避免吸湿, 建议在通风橱中操作。溶解时优先选用无水 DMSO, 配制成母液后分装冻存, 避免反复冻融。实验过程中需佩戴防护手套、护目镜及实验服。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，批次间一致性控制在 $\pm 1\%$ 以内。残留溶剂符合 ICH Q3C 标准，重金属含量 $< 10\text{ppm}$ 。安全数据表明，该化合物可能对眼睛和皮肤有刺激性，操作时应避免直接接触。如发生意外接触，需立即用大量清水冲洗至少 15 分钟并就医。废弃物应作为危险化学品处理，遵守当地环保法规。详细毒理学数据可参考材料安全数据表（MSDS）。