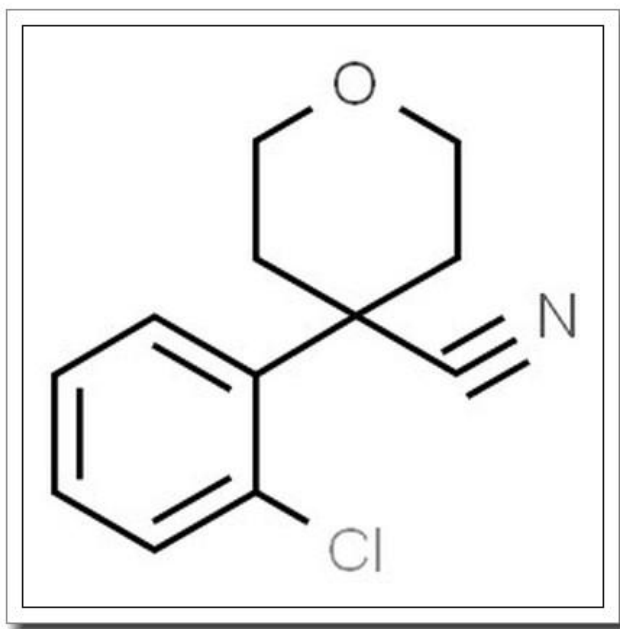


4-(2-Chloro-phenyl)-tetrahydro-pyran-4-carbonitrile

4-(2-Chloro-phenyl)-tetrahydro-pyran-4-carbonitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-(2-Chloro-phenyl)-tetrahydro-pyran-4-carbonitrile
中文名称	4-(2-Chloro-phenyl)-tetrahydro-pyran-4-carbonitrile
CAS 号	1250512-48-1
分子式	C ₁₂ H ₁₂ ClN ₀ O
分子量	221.68
纯度	>96%

产品说明

4-(2-氯苯基)-四氢吡喃-4-甲腈产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 4-(2-Chloro-phenyl)-tetrahydro-pyran-4-carbonitrile, CAS 号为 1250512-48-1, 是一种含氯芳香杂环化合物。其分子式为 C₁₂H₁₂ClN₀, 分子量 221.68, 纯度经 HPLC 检测确认 >96%。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 具有吡喃环与苯环的刚性结构, 腈基的引入增强了其反应活性。在常温下稳定, 微溶于水, 易溶于甲醇、乙醇等有机溶剂。

2. 生物化学功能与重要性

作为吡喃类衍生物, 该化合物可通过氢键和疏水相互作用与生物大分子结合。其结构中的氯原子和腈基使其成为药物研发中重要的中间体, 特别适用于构建中枢神经系统药物分子骨架。在激酶抑制和受体调节研究中显示出潜在活性, 可能影响细胞信号传导通路。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于医药研发领域, 具体用途包括: 作为关键中间体用于抗抑郁、抗焦虑类药物的合成; 在抗癌药物筛选中作为先导化合物修饰单元; 用于构建杂环化合物库进行高通量筛选。在材料科学领域, 可用于制备具有特殊光学性能的有机功能材料。

4. 储存条件与使用建议

建议储存于 2-8°C 干燥避光环境中, 保质期 24 个月。开封后需充惰性气体保护。使用时应佩戴防护手套和护目镜, 在通风橱中操作。溶解时建议先用少量 DMSO 助溶, 再用缓冲液稀释。避免与强氧化剂接触, 工作浓度需通过预实验确定。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 NMR、LC-MS 和元素分析等多重验证, 符合研发级标准。急性毒性数据显示其 LD₅₀ (大鼠口服) >500mg/kg, 属于低毒类化合物。但接触后仍可能引起皮

肤刺激，如不慎接触眼睛应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地化学品管理法规。