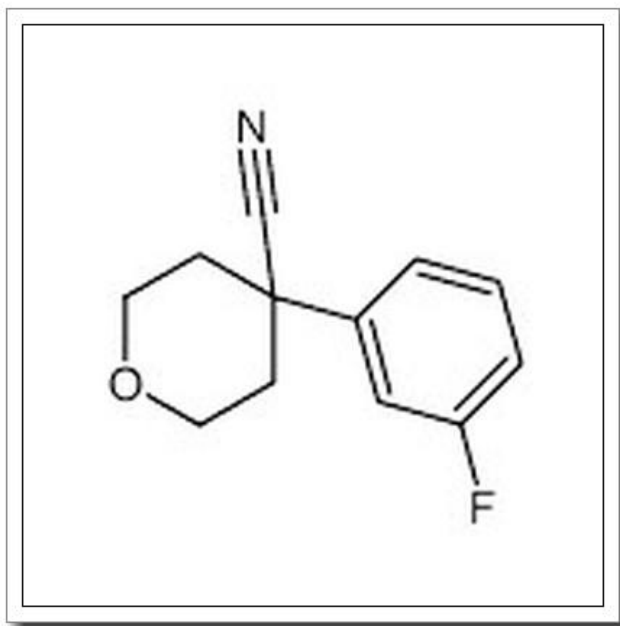


4-(3-fluorophenyl)oxane-4-carbonitrile

4-(3-fluorophenyl)oxane-4-carbonitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-(3-fluorophenyl)oxane-4-carbonitrile
中文名称	4-(3-氟苯基)氧烷-4-腈
CAS 号	1035261-79-0
分子式	C ₁₂ H ₁₂ FNO
分子量	205.228
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

4-(3-fluorophenyl)oxane-4-carbonitrile (CAS 号: 1035261-79-0) 是一种含氟杂环化合物, 分子式为 $C_{12}H_{12}FN_0$, 分子量为 205.228。该化合物由氟代苯基与四氢吡喃环通过碳-碳键连接, 并带有氰基官能团, 结构独特。其纯度高于 96%, 外观通常为白色至类白色固体或粉末。该化合物在有机溶剂 (如甲醇、乙腈、二甲基亚砜) 中具有良好的溶解性, 但在水中溶解度较低。其化学稳定性较高, 但在强酸或强碱条件下可能发生水解反应。

2. 生物化学功能与重要性

4-(3-fluorophenyl)oxane-4-carbonitrile 作为一种含氟杂环化合物, 在药物化学和材料科学中具有重要价值。氟原子的引入可显著改变分子的电子分布和脂溶性, 从而影响其生物活性和代谢稳定性。氰基官能团则为其提供了进一步化学修饰的位点, 使其成为合成复杂分子的关键中间体。该化合物可能用于靶向特定酶或受体的药物研发, 尤其在神经科学和抗肿瘤领域具有潜在应用前景。

3. 主要应用领域与具体用途

该化合物主要应用于以下领域:

- 医药研发: 作为先导化合物或中间体, 用于合成具有生物活性的小分子药物, 如激酶抑制剂或 G 蛋白偶联受体调节剂。
- 材料科学: 用于合成含氟高分子材料, 改善材料的耐热性和化学稳定性。
- 学术研究: 作为工具分子, 用于研究氟原子对分子构效关系的影响。

4. 储存条件与使用建议

建议将本品置于干燥、避光的环境中, 储存温度为 $2-8^{\circ}C$, 长期保存需充入惰性气体 (如氮气)。开封后应尽快使用, 避免反复冻融或暴露于潮湿空气。使用时需在通风橱中操作, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解建议使用无水有机溶剂, 并根据实验需求配制适当浓度的溶液。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测，纯度 $\geq 96\%$ ，并提供相关分析证书（COA）。其安全性数据如下：

- 潜在危害：可能对眼睛、皮肤和呼吸道产生刺激性，操作时需佩戴防护手套、护目镜和口罩。
- 应急处理：如接触皮肤，立即用大量清水冲洗；如误入眼睛，用生理盐水冲洗并就医。
- 废弃物处理：需按照实验室有害化学品处置规范进行，不可直接排入下水道。

本品仅供科研用途，不适用于人体或动物实验。使用前请查阅最新版材料安全数据表（MSDS）以获取详细信息。