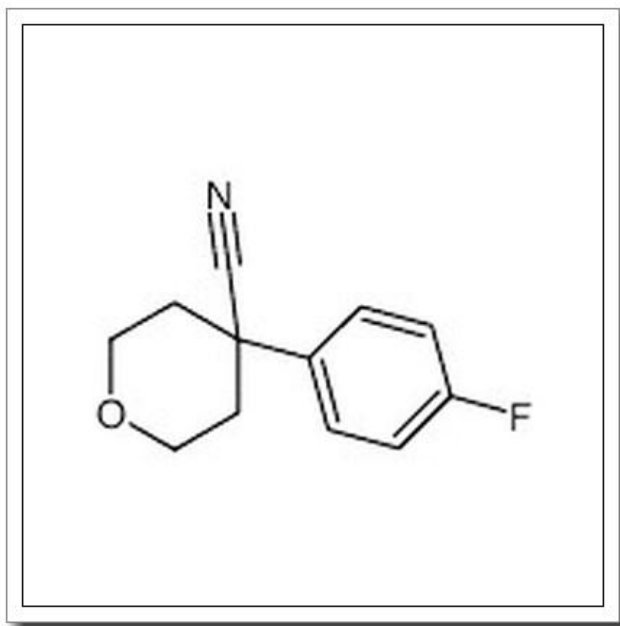


4-(4-fluorophenyl)oxane-4-carbonitrile

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



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-(4-fluorophenyl)oxane-4-carbonitrile
中文名称	4-(4-氟苯基)氧烷-4-腈
CAS 号	473706-10-4
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-(4-fluorophenyl)oxane-4-carbonitrile (CAS 号: 473706-10-4) 是一种有机化合物, 分子式为 $C_{12}H_{12}FN_0$, 分子量为 205.228。该化合物由含氟苯环与氧杂环己烷结构通过碳腈基连接而成, 纯度高于 96%。其独特的结构使其在有机合成和药物化学中具有重要价值。该化合物为白色至类白色固体, 可溶于常见有机溶剂如二甲基亚砜 (DMSO) 和甲醇, 但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

4-(4-fluorophenyl)oxane-4-carbonitrile 作为一种含氟杂环化合物, 其氟原子的引入可显著改变分子的电子分布和生物活性。氟化芳环结构在药物设计中常用于增强化合物的代谢稳定性和细胞膜穿透性。此外, 氧杂环己烷骨架和腈基的存在使其成为合成复杂生物活性分子的关键中间体, 尤其在神经科学和抗炎药物研发领域具有潜在应用价值。

3. 主要应用领域与具体用途

该化合物主要用于医药研发和有机合成领域。在药物化学中, 它可作为构建块用于合成含氟杂环类药物候选分子, 例如中枢神经系统 (CNS) 靶向化合物或抗炎剂。此外, 在材料科学中, 其结构特性可用于开发新型液晶材料或功能性高分子单体。具体用途包括但不限于: 药物中间体合成、结构-活性关系 (SAR) 研究以及高通量筛选中的分子库构建。

4. 储存条件与使用建议

建议将本品密封保存于干燥、避光的环境中, 储存温度控制在 $2-8^{\circ}C$ 以保持稳定性。开封后应充入惰性气体 (如氮气) 以减少氧化风险。使用时应佩戴防护手套、护目镜和实验服, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解时建议使用干燥的有机溶剂, 并在通风橱中操作。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测确认纯度 $>96\%$, 并提供批次相关的分析证书 (COA)。其潜在

危害包括对眼睛和皮肤的刺激性，操作时应遵循化学品通用安全规范。如发生接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地环保法规，建议通过专业化学品回收机构处置。

以上信息基于现有实验数据，具体应用需结合用户实验条件进一步验证。