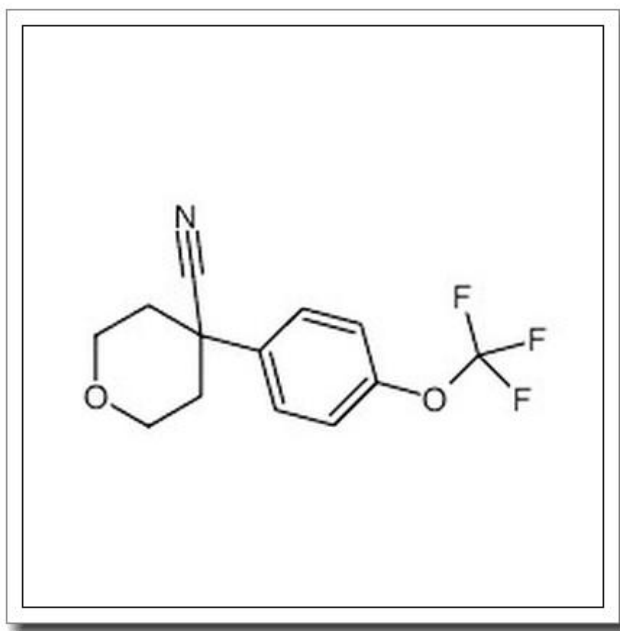


4-[4-(trifluoromethoxy)phenyl]oxane-4-carbonitrile

4-[4-(trifluoromethoxy)phenyl]oxane-4-carbonitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-[4-(trifluoromethoxy)phenyl]oxane-4-carbonitrile
中文名称	4-[4-(trifluoromethoxy)phenyl]oxane-4-carbonitrile
CAS 号	473706-16-0
分子式	C ₁₃ H ₁₂ F ₃ N ₂ O ₂
分子量	271.235
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

4-[4-(三氟甲氧基)苯基]氧杂环己烷-4-甲腈 (CAS 号: 473706-16-0) 是一种含氟有机化合物, 分子式为 $C_{13}H_{12}F_3NO_2$, 分子量为 271.235。该化合物以氧杂环己烷为母核, 苯环 4 位取代三氟甲氧基, 4 位碳上连接氰基, 结构独特。其纯度高于 96%, 常温下为白色至类白色固体, 具有较高的化学稳定性和疏水性, 可溶于常见有机溶剂如二甲基亚砷 (DMSO) 和甲醇, 但不溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物因其三氟甲氧基和氰基的协同效应, 在药物化学和材料科学中表现出显著的应用潜力。三氟甲氧基的强吸电子特性可增强分子与靶标蛋白的相互作用, 而氰基可作为氢键受体或参与后续衍生化反应。其结构特征使其成为药物研发中重要的中间体, 尤其在神经退行性疾病和抗炎药物研究中具有探索价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药研发和有机合成领域。具体用途包括: 作为小分子抑制剂或激动剂的候选结构, 用于高通量筛选; 作为关键中间体合成含氟类药物; 在材料科学中用于构建液晶材料或功能性高分子单体。此外, 其独特的氟代芳环结构也适用于放射性标记前体的合成。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 下避光干燥储存, 长期保存需充惰性气体保护。开封后需密封防潮, 避免反复冻融。使用时需在通风橱中操作, 佩戴防护手套和护目镜。溶解推荐使用无水 DMSO, 配制成母液后分装保存, 避免水溶液条件下长期放置。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 批次间提供 COA 分析报告。安全信息提示: 该化合物可能对眼睛和皮肤有刺激性, 接触后需立即用大量清水冲洗。不属于剧毒物质, 但仍需按一般化学品规范处置废弃物。运输时归类为普通化学品, 需避免与强氧化剂共存。实验操作建议参考 MSDS 中的详细防护措施。