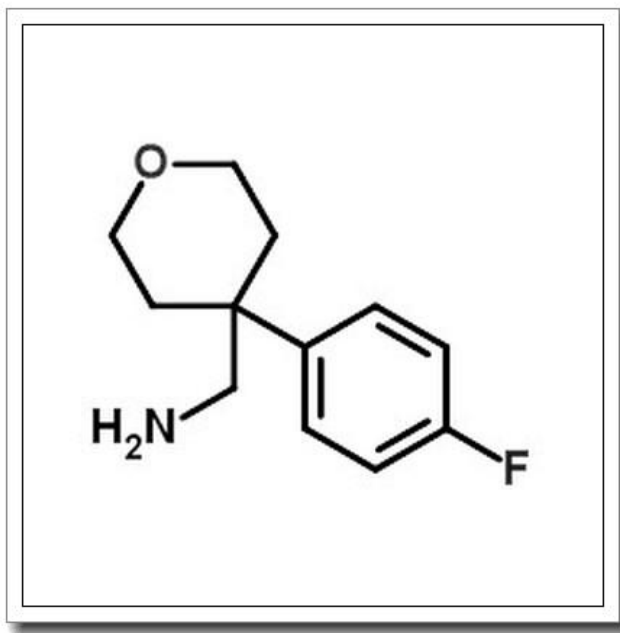


C-[4-(4-氟-苯基)-四氢-吡喃-4-基]-甲胺

[4-(4-fluorophenyl)oxan-4-yl]methanamine



产品基本信息

属性	值
化学名称	[4-(4-fluorophenyl)oxan-4-yl]methanamine
中文名称	C-[4-(4-氟-苯基)-四氢-吡喃-4-基]-甲胺
CAS 号	889939-79-1
分子式	C ₁₂ H ₁₆ FNO
分子量	209.26
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为[4-(4-fluorophenyl)oxan-4-yl]methanamine (C-[4-(4-氟-苯基)-四氢-吡喃-4-基]-甲胺), CAS 号 889939-79-1, 分子式 C₁₂H₁₆FN₀, 分子量 209.26, 是一种含氟杂环胺类化合物。其结构特征为四氢吡喃环与对氟苯基的刚性组合, 末端甲胺基团赋予其良好的亲核性和反应活性。纯度经 HPLC 验证 ≥96%, 外观通常为白色至类白色结晶粉末, 易溶于有机溶剂如甲醇、DMSO, 微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为多功能合成砌块, 其结构中的氟原子可增强代谢稳定性, 而四氢吡喃环则提供空间位阻效应, 在药物设计中常用于优化分子亲脂性 (LogP) 和血脑屏障穿透性。甲胺基团可作为关键药效团参与氢键形成或进一步衍生化, 在激酶抑制剂、神经活性分子开发中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发领域:

- 中枢神经系统药物候选分子的核心骨架
- 5-HT/多巴胺受体调节剂的结构修饰前体
- 氟代芳香族化合物库构建的关键中间体

实验室用途包括:

- 放射性标记示踪剂的合成 (利用氟原子特性)
- 金属有机催化剂配体的制备

4. 储存条件与使用建议

储存于-20℃惰性气体 (如氩气) 保护的密闭容器中, 避免光照与湿度。开封后建议分装使用, 剩余物料需充氮密封。溶解时优先选用无水 DMSO, 工作液现配现用。操作需在通风橱中进行, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。

5. 质量控制与安全信息

批次质检报告包含:

- HPLC 纯度 ($\geq 96\%$)
- 水分含量 (Karl Fischer 法 $< 0.5\%$)
- 残留溶剂 (GC 符合 ICH Q3C 标准)

安全数据:

- GHS 分类: 皮肤刺激 (Category 2)、眼刺激 (Category 2)
- 应急处理: 接触后用大量清水冲洗 15 分钟, 就医
- 废弃处置: 按危险化学品规范处理