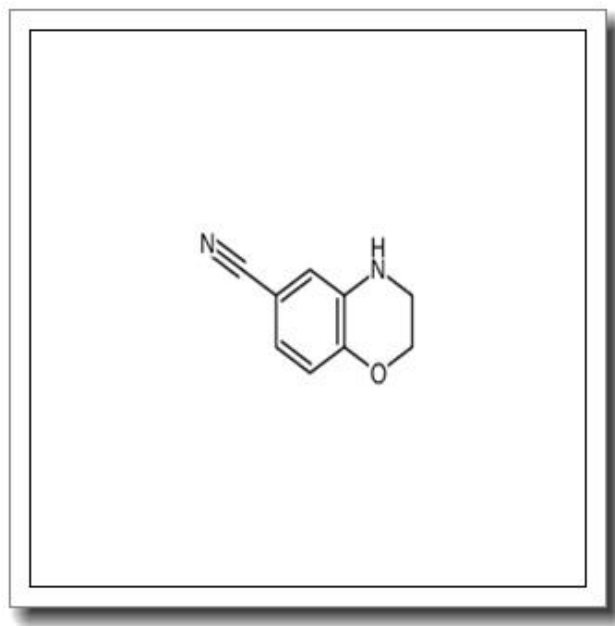


3,4-二氢-2H-苯并[1,4]噁嗪-6-甲腈

3, 4-Dihydro-2H-1, 4-benzoxazine-6-carbonitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	3, 4-Dihydro-2H-1, 4-benzoxazine-6-carbonitrile
中文名称	3, 4-二氢-2H-苯并[1, 4]噁嗪-6-甲腈
CAS 号	928118-07-4
分子式	C ₉ H ₈ N ₂ O
分子量	160.173
纯度	≥96%

产品说明

3,4-二氢-2H-苯并[1,4]噁嗪-6-甲腈 (3,4-Dihydro-2H-1,4-benzoxazine-6-carbonitrile) 是一种重要的有机杂环化合物, CAS 号为 928118-07-4, 分子式为 C₉H₈N₂O, 分子量为 160.173。该化合物为白色至类白色结晶或粉末, 纯度不低于 96%, 具有稳定的化学性质, 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。其结构中的苯并噁嗪环和氰基官能团赋予其独特的反应活性, 使其成为有机合成和药物研发中的关键中间体。

在生物化学领域, 该化合物因其杂环结构和极性官能团, 常作为药物分子设计的核心骨架。苯并噁嗪类衍生物已被广泛研究, 显示出抗菌、抗炎和神经保护等潜在生物活性。其氰基基团可通过进一步反应转化为羧酸、酰胺等官能团, 为结构修饰提供多样性。此外, 该分子在激酶抑制剂和 G 蛋白偶联受体 (GPCR) 调节剂的开发中具有重要价值。

该产品的主要应用领域包括医药研发和精细化工。在药物化学中, 它可用于合成抗抑郁、抗肿瘤或抗感染药物的先导化合物。在材料科学中, 其衍生物可作为光电材料的构建单元。实验室中常将其用于杂环化合物的结构-活性关系 (SAR) 研究, 或作为手性催化剂的配体前体。

储存条件方面, 建议将产品密封保存于干燥、阴凉的环境中, 避免光照和潮湿, 适宜温度为 2-8°C。开封后需充入惰气 (如氮气) 以延长稳定性。使用时应佩戴防护手套和护目镜, 在通风橱中操作, 避免吸入粉尘或接触皮肤。若需溶解, 推荐使用无水有机溶剂以确保稳定性。

质量控制通过高效液相色谱 (HPLC) 和核磁共振 (NMR) 进行批次验证, 确保纯度和结构准确性。安全信息显示, 该化合物可能对眼睛和皮肤有刺激性, 安全数据表 (SDS) 中将其归类为危害类别 2。废弃处理需遵循当地法规, 不可直接排入下水道。实验操作中如发生意外接触, 应立即用大量清水冲洗并就医。