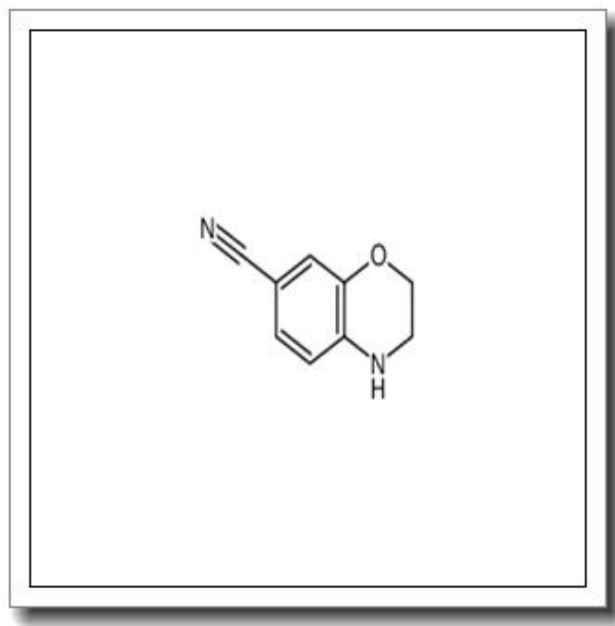


3,4-二氢-2H-苯并[1,4]噁嗪-7-甲腈

3,4-Dihydro-2H-1,4-benzoxazine-7-carbonitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	3,4-Dihydro-2H-1,4-benzoxazine-7-carbonitrile
中文名称	3,4-二氢-2H-苯并[1,4]噁嗪-7-甲腈
CAS 号	566158-19-8
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-7-甲腈产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3,4-二氢-2H-苯并[1,4]噁嗪-7-甲腈（CAS 号：566158-19-8）是一种含苯并噁嗪骨架的有机化合物，分子式为 C₉H₈N₂O，分子量为 160.173。该化合物以白色至类白色结晶或粉末形式存在，纯度≥96%，具有典型的芳香杂环结构特征，其氰基官能团赋予其独特的反应活性。

2. 生物化学功能与重要性

作为苯并噁嗪类衍生物，该化合物在药物化学和材料科学领域具有重要价值。其结构中的噁嗪环和氰基可作为关键药效团，参与氢键形成和分子间相互作用，常用于构建具有生物活性的先导化合物。在生物体系中，此类结构常与酶活性位点或受体结合，表现出潜在的抗菌、抗炎或神经调节活性。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于医药研发和有机合成领域。在药物开发中，用作合成抗抑郁剂、抗菌剂或激酶抑制剂的中间体。在材料科学中，可用于制备功能性高分子或光电材料。具体实验用途包括：

- 作为杂环砌块用于组合化学库构建
- 用于结构-活性关系（SAR）研究中的核心骨架修饰
- 在有机催化反应中作为配体或底物

4. 储存条件与使用建议

建议在干燥、避光条件下储存，保持温度 2-8° C。开封后需充惰性气体保护，避免反复冻融。使用时需在通风橱中操作，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明其易溶于二甲基亚砜（DMSO）、二氯甲烷等有机溶剂，水溶性较差，建议预先配制储备液。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度≥96%，批号关联完整分析证书（COA）。安全数据表明其

属于刺激性化学品，操作时应佩戴防护手套、护目镜及实验服。如接触皮肤，立即用大量清水冲洗。废弃物需按危险化学品规范处置。详细安全信息请参阅随货提供的MSDS（材料安全数据表）。

注：本产品仅限科研用途，不适用于医药、食品或家庭用途。使用者应具备专业化学知识并遵守实验室安全规范。