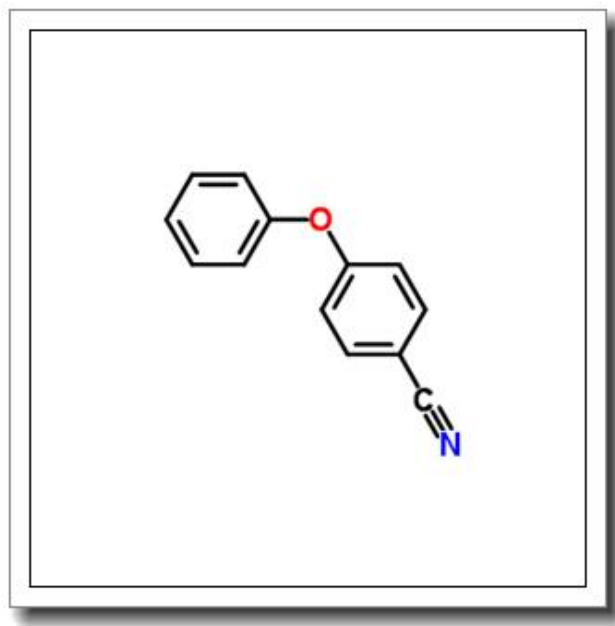


4-苯氧基苯腈

4-phenoxybenzotrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-phenoxybenzotrile
中文名称	4-苯氧基苯腈
CAS 号	3096-81-9
分子式	C ₁₃ H ₉ N ₁ O
分子量	195.217
纯度	≥ 96%

产品说明

4-苯氧基苯腈产品说明书

1. 产品概述与化学特性

4-苯氧基苯腈（4-phenoxybenzotrile）是一种有机芳香化合物，化学式为 $C_{13}H_9NO$ ，分子量为 195.217，CAS 号为 3096-81-9。本品为白色至类白色结晶或粉末，纯度 $\geq 96\%$ ，具有典型的腈类特征性气味。其结构中包含苯氧基与苯腈基团，赋予其良好的脂溶性和化学稳定性，易溶于有机溶剂如乙醇、丙酮和二甲亚砜，微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为苯衍生物，4-苯氧基苯腈是合成多种精细化学品的关键中间体。其腈基（-CN）具有高反应活性，可通过水解、还原或环化反应转化为羧酸、胺或杂环化合物。在药物化学中，该结构片段常见于抗菌剂、抗炎药及激酶抑制剂的研发中，尤其在构建芳醚类活性分子时具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本品广泛应用于医药、农药和材料科学领域。在医药研发中，用于合成非甾体抗炎药（NSAIDs）前体或靶向药物载体；在农药工业中，可作为杀虫剂或除草剂的中间体；在材料领域，可用于制备液晶单体或高分子改性添加剂。此外，在学术研究中常用于有机合成方法学开发及结构-活性关系（SAR）研究。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于干燥、阴凉处（2-8°C），避免光照与潮湿环境。开封后需充惰性气体（如氮气）保护以延长稳定性。操作时需佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩，避免吸入粉尘或直接接触皮肤。使用场所应具备通风设施，残余物需按危险化学品规范处置。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，水分含量 $\leq 0.5\%$ ，重金属残留符合 USP 标准。安全数据（SDS）显示其急性毒性（LD50 大鼠经口） >2000 mg/kg，属于低毒类物质，

但长期暴露可能引起呼吸道或皮肤刺激。运输时归类为普通化学品，需避免与强氧化剂混储。如发生泄漏，需用吸附材料收集并转移至专用废弃物容器。

注：以上信息基于现有实验数据，实际应用前请根据具体需求进一步验证。