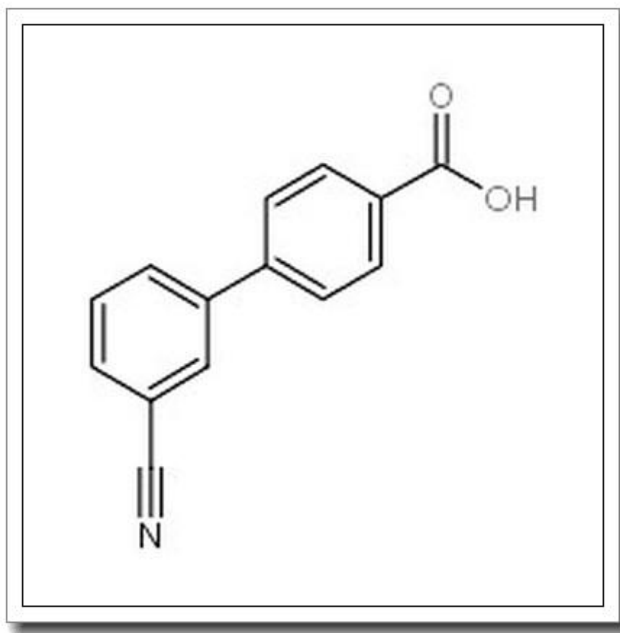


3-氰基-[1,1-联苯]-4-羧酸

4-(3-Cyanophenyl)benzoic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-(3-Cyanophenyl)benzoic acid
中文名称	3-氰基-[1,1-联苯]-4-羧酸
CAS 号	5728-45-0
分子式	C ₁₄ H ₉ N ₂ O ₂
分子量	223.227
纯度	>96%

产品说明

3-氰基-[1,1-联苯]-4-羧酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3-氰基-[1,1-联苯]-4-羧酸（化学名称：4-(3-Cyanophenyl)benzoic acid）是一种有机芳香羧酸衍生物，CAS 号为 5728-45-0，分子式为 C₁₄H₉N₂O₂，分子量为 223.227。该化合物为白色至类白色结晶粉末，纯度高于 96%，具有联苯骨架结构，苯环上分别连接氰基（-CN）和羧基（-COOH）官能团，赋予其独特的化学活性和溶解性（微溶于水，易溶于有机溶剂如 DMSO 和甲醇）。

2. 生物化学功能与重要性

作为多功能合成砌块，该化合物可通过羧基参与酯化、酰胺化反应，氰基则适用于还原、水解或环化反应。其联苯结构在药物化学中常用于构建靶向分子，尤其是激酶抑制剂或 G 蛋白偶联受体调节剂的开发。氰基的强电子 withdrawing 效应可调节分子整体的电荷分布，影响其与生物靶点的相互作用。

3. 主要应用领域与具体用途

3-氰基-[1,1-联苯]-4-羧酸广泛应用于医药中间体、材料科学和有机合成领域。在药物研发中，它是构建抗肿瘤、抗炎化合物的重要前体；在材料领域，可用于合成液晶单体或光电材料的功能性组分。实验室中常作为配体或催化剂载体，亦用于金属有机框架（MOFs）的修饰。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于干燥、避光环境中，温度控制在 2-8° C 以延长稳定性。开封后需充惰性气体（如氮气）保护，避免吸湿或氧化。使用时需在通风橱中操作，佩戴防护手套和护目镜。溶解性测试表明，推荐使用 DMSO 配制母液（浓度 ≤ 10 mM），后续可用缓冲液稀释。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 ≥ 96%，MS 和 NMR 验证结构。安全数据表明，其急性毒性（LD₅₀）为中等（大鼠口服 > 500 mg/kg），对皮肤和眼睛有刺激性。操作时应避免

吸入粉尘，若接触立即用大量清水冲洗。废弃物需按危险化学品规范处置，MSDS可随货提供。

注：以上信息基于现有实验数据，实际应用前请进行小试验证。