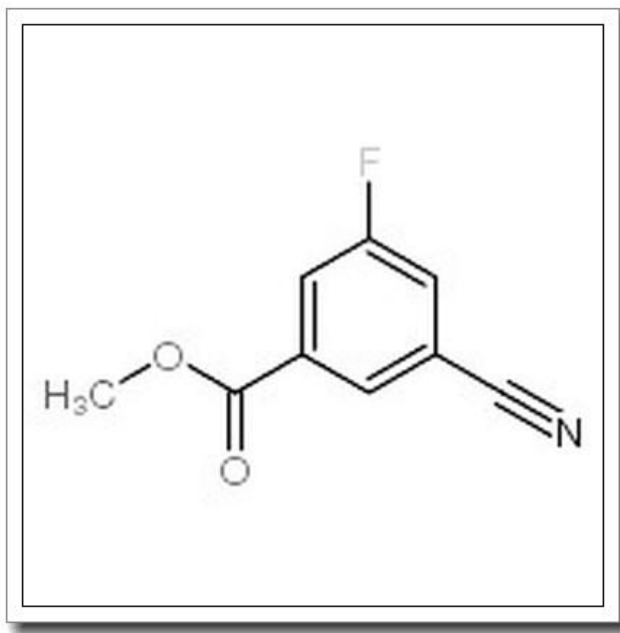


## 3-氰基-5-氟苯甲酸甲酯

*methyl 3-cyano-5-fluorobenzoate*



### 产品基本信息

属性	值
化学名称	methyl 3-cyano-5-fluorobenzoate
中文名称	3-氰基-5-氟苯甲酸甲酯
CAS 号	886732-29-2
分子式	C <sub>9</sub> H <sub>6</sub> FN <sub>2</sub> O <sub>2</sub>
分子量	179.148
纯度	>96%

## 产品说明

### 3-氰基-5-氟苯甲酸甲酯产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

3-氰基-5-氟苯甲酸甲酯 (methyl 3-cyano-5-fluorobenzoate) 是一种含氟芳香族化合物，化学式为  $C_9H_6FN_2O_2$ ，分子量为 179.148，CAS 号为 886732-29-2。该化合物为白色至类白色结晶或粉末，纯度高于 96%，具有显著的化学稳定性和溶解性，可溶于常见有机溶剂如甲醇、乙醇和二甲基亚砜 (DMSO)。其结构中的氰基和氟原子赋予其独特的电子效应，使其在有机合成中作为关键中间体广泛应用。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为苯甲酸酯衍生物，该化合物在生物化学领域具有重要作用。氰基和氟原子的引入可调节分子的极性、代谢稳定性和生物活性，使其成为药物分子设计中的重要结构单元。其在酶抑制、受体结合研究中表现出潜在活性，尤其在抗肿瘤和中枢神经系统药物研发中备受关注。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于医药和农药中间体的合成。在医药领域，它是构建含氟杂环化合物的重要前体，可用于开发新型激酶抑制剂或抗菌剂。在农药化学中，其结构可作为高效杀虫剂或除草剂的活性片段。此外，在材料科学中，该化合物可用于合成功能性高分子或液晶材料。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议在  $-20^{\circ}C$  至  $4^{\circ}C$  的干燥环境中避光保存，长期储存需充惰性气体保护。开封后应密封防潮，避免与强氧化剂或酸碱接触。使用时应佩戴防护手套、护目镜，并在通风橱中操作。溶解时建议优先选用 DMSO 或 DMF，配制溶液后需尽快使用以防止水解。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度  $\geq 96\%$ ，批次间质量稳定。MSDS 数据显示其具有刺激

性，接触皮肤或眼睛需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应作为有害化学废物处理，遵守当地环保法规。运输时需贴有“有害品”标签，避免与食品或饲料混装。

注：以上信息基于现有实验数据，实际应用前建议进行小试验证。技术咨询请联系专业供应商或研发团队。