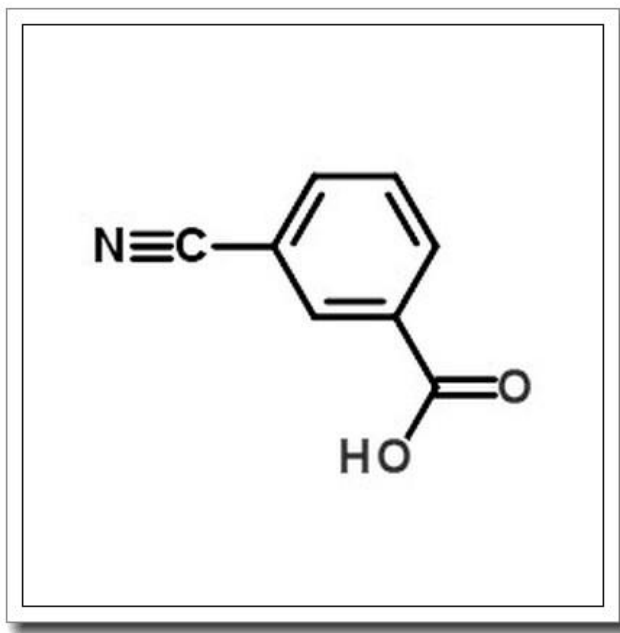


3-氰基苯甲酸

3-Cyanobenzoic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-Cyanobenzoic acid
中文名称	3-氰基苯甲酸
CAS 号	1877-72-1
分子式	C ₈ H ₅ N ₂ O ₂
分子量	147.131
纯度	>96%

产品说明

3-氰基苯甲酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3-氰基苯甲酸 (3-Cyanobenzoic acid) 是一种有机芳香羧酸衍生物, 化学式为 $C_8H_5NO_2$, 分子量为 147.131。其结构特征为苯甲酸分子中苯环的 3 位被氰基取代, 兼具羧酸和氰基的化学活性。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, CAS 号为 1877-72-1, 纯度标准 >96%。其熔点为 190-194° C, 可溶于极性有机溶剂如甲醇、乙醇和 DMF, 微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为苯甲酸衍生物, 3-氰基苯甲酸在生物化学领域具有多重功能。氰基的强吸电子特性使其成为药物中间体设计中重要的结构单元, 可参与亲核加成、水解等反应。羧基的存在使其易于形成盐或酯类衍生物, 在酶抑制剂和受体配体的合成中具有广泛应用。该化合物还可作为金属配体的前体, 在催化反应中发挥作用。

3. 主要应用领域与具体用途

3-氰基苯甲酸主要应用于医药、农药和材料科学领域。在医药研发中, 它是合成抗肿瘤药物、抗炎剂和中枢神经系统药物的重要中间体。农药工业中用于制备高效低毒杀虫剂和除草剂。此外, 在功能材料领域, 可作为液晶单体和高分子聚合物的改性剂。实验室中常用于有机合成教学示范, 展示芳香亲电取代和官能团转换反应。

4. 储存条件与使用建议

本品需密封保存于阴凉干燥处, 推荐储存温度为 2-8° C, 避免光照和潮湿环境。开封后建议充氮保护以延长稳定性。使用时应佩戴防护手套、护目镜和防尘口罩, 在通风橱中操作。溶解时优先选用 DMF 或碱性水溶液, 避免与强氧化剂接触。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 水分含量 $\leq 0.5\%$, 重金属残留符合 USP 标准。安全数据表明, 该化合物对眼睛和皮肤有刺激性, LD50 (大鼠经口) 为 1250

mg/kg。意外接触时需立即用大量清水冲洗，必要时就医。废弃物处理应遵守当地化学品管理法规，不可直接排入下水道。

注：本产品仅供科研用途，不适用于食品、药品或化妆品直接添加。具体应用前请查阅最新文献并开展小试实验。