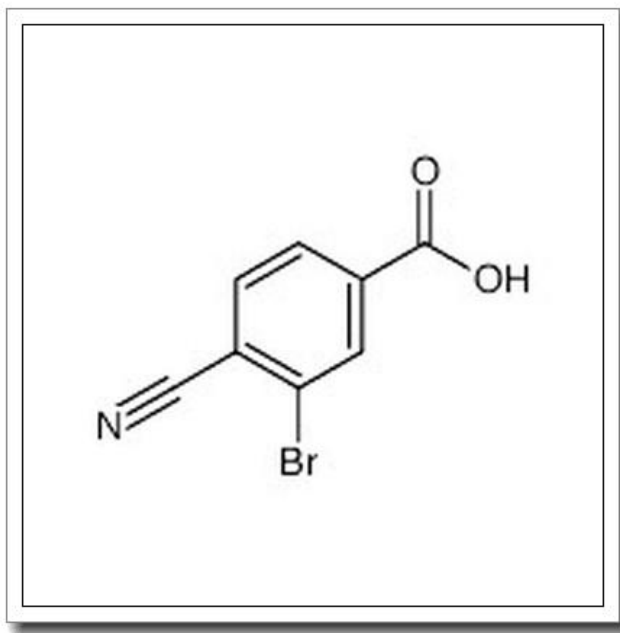


3-溴-4-氰基苯甲酸

3-Bromo-4-cyanobenzoic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-Bromo-4-cyanobenzoic acid
中文名称	3-溴-4-氰基苯甲酸
CAS 号	58123-69-6
分子式	C ₈ H ₄ BrN ₂ O ₂
分子量	226.027
纯度	>96%

产品说明

3-溴-4-氰基苯甲酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3-溴-4-氰基苯甲酸 (3-Bromo-4-cyanobenzoic acid) 是一种有机芳香族化合物，化学式为 $C_8H_4BrNO_2$ ，分子量为 226.027，CAS 号为 58123-69-6。该化合物由苯甲酸骨架修饰而成，在苯环的 3 位和 4 位分别引入溴原子和氰基官能团，赋予其独特的电子效应和反应活性。其纯度标准为 $>96\%$ ，外观通常为白色至类白色结晶性粉末。

2. 生物化学功能与重要性

作为多功能合成砌块，3-溴-4-氰基苯甲酸兼具卤素和氰基的化学特性。溴原子可作为亲电取代反应的活性位点，而氰基则能参与缩合或转化为其他官能团（如羧酸或酰胺）。这种双重修饰使其在药物化学和材料科学中具有重要价值，尤其适用于构建复杂分子骨架或作为中间体参与多步合成。

3. 主要应用领域与具体用途

该化合物广泛应用于医药研发、有机合成及材料科学领域。在药物化学中，它是合成激酶抑制剂或抗肿瘤活性分子的关键中间体；在材料领域，可用于制备液晶材料或功能性高分子单体。此外，其苯甲酸结构使其易于衍生化，适用于金属有机框架 (MOF) 材料的配体设计。

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 $2-8^{\circ}C$ 以延长稳定性。使用时需在惰性气体（如氮气）保护下操作，避免与强氧化剂或还原剂直接接触。溶解性测试表明，该产品易溶于极性有机溶剂（如 DMF、DMSO），微溶于水，实验过程中需根据反应体系选择适当溶剂。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 验证纯度，并提供批次相关的 COA（质量分析证书）。安全数据表明，其具有刺激性，操作时应穿戴防护手套、护目镜及实验服，避免吸入粉尘或

接触皮肤。如意外接触，需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地法规，建议通过专业化学废料回收渠道处置。

（注：本说明基于现有技术资料编制，具体应用需结合实验条件进一步优化。）