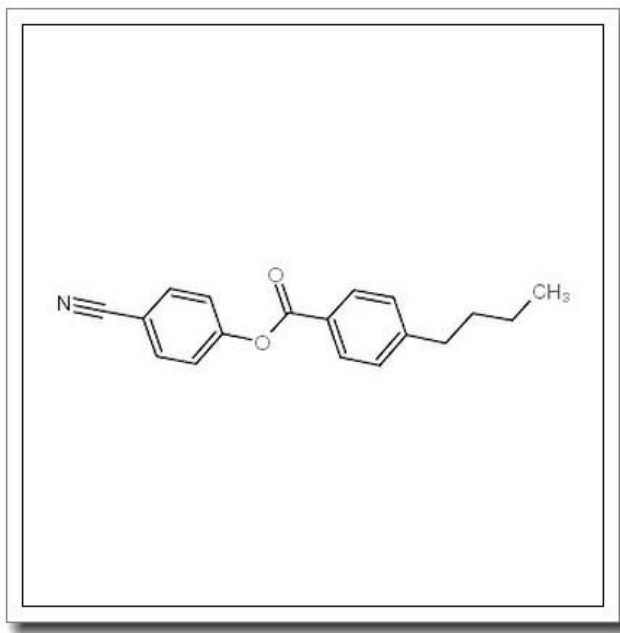


# 4-丁基苯甲酸-4-氰基苯酯

*4-Cyanophenyl 4-butylbenzoate*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	4-Cyanophenyl 4-butylbenzoate
中文名称	4-丁基苯甲酸-4-氰基苯酯
CAS 号	38690-77-6
分子式	C <sub>18</sub> H <sub>17</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>
分子量	279.333
纯度	>96%

## 产品说明

### 4-丁基苯甲酸-4-氰基苯酯产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

4-丁基苯甲酸-4-氰基苯酯 (4-Cyanophenyl 4-butylbenzoate) 是一种有机化合物, 化学式为  $C_{18}H_{17}NO_2$ , 分子量为 279.333。其 CAS 号为 38690-77-6, 纯度标准高于 96%。该化合物为白色至类白色结晶粉末, 具有苯甲酸酯和氰基苯基的典型结构特征, 表现出良好的热稳定性和化学惰性, 适合作为液晶材料中间体或有机合成砌块。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为一种酯类衍生物, 该化合物可通过氰基和酯键参与多种化学反应, 如水解、缩合或亲核取代。其分子结构中的刚性苯环和柔性丁基链赋予其独特的介晶性质, 因此在液晶材料领域具有重要价值。此外, 氰基的强极性使其可作为氢键受体, 在分子识别或超分子组装中发挥作用。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于液晶显示材料 (LCD) 的合成, 是制备向列相液晶的关键中间体。在科研领域, 可用于研究介晶相行为或开发新型光电材料。此外, 在有机合成中可作为手性辅基或药物分子修饰的前体。具体应用需结合实验设计, 例如通过酯交换反应调控液晶相变温度。

#### 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。使用前需恢复至室温以避免结露。操作时需佩戴防护手套和护目镜, 在通风橱中进行称量与溶解。溶剂推荐使用 DMF 或 THF, 溶解性测试显示其在 25°C 下溶解度大于 50mg/mL。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度  $\geq 96\%$ , 批次间差异小于 1%。MS 和 NMR 谱图数据可随货提供。安全提示: 避免吸入粉尘或接触皮肤, 如不慎接触需用大量清水冲洗。其

LD50（大鼠口服）为 3200mg/kg，属于低毒类物质，但仍需按危险化学品规范处置废弃物。

注：以上信息基于现有实验数据，实际应用前请查阅最新文献或进行小试验证。