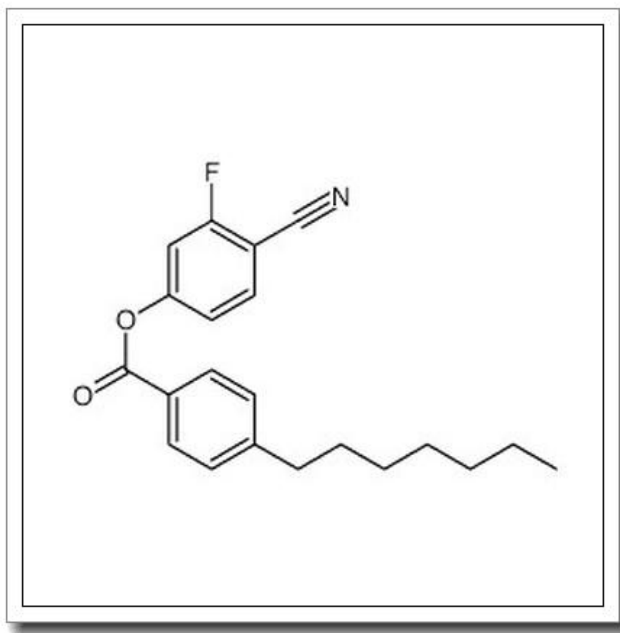


4-正庚基苯甲酸-3-氟-4-氰基苯酯

Benzoic acid, 4-heptyl-, 4-cyano-3-fluorophenyl ester



产品基本信息

属性	值
化学名称	Benzoic acid, 4-heptyl-, 4-cyano-3-fluorophenyl ester
中文名称	4-正庚基苯甲酸-3-氟-4-氰基苯酯
CAS 号	86776-54-7
分子式	C ₂₁ H ₂₂ FN ₂ O ₂
分子量	339.403
纯度	>96%

产品说明

4-正庚基苯甲酸-3-氟-4-氰基苯酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 Benzoic acid, 4-heptyl-, 4-cyano-3-fluorophenyl ester, CAS 号为 86776-54-7, 分子式为 C₂₁H₂₂FN₂O₂, 分子量为 339.403。该化合物是一种含氟芳香族酯类衍生物, 纯度大于 96%, 常温下为白色至类白色结晶或粉末。其结构中的庚基链、氰基和氟原子赋予其独特的极性、脂溶性及化学稳定性, 适合作为有机合成中间体或功能材料单体。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物可通过酯键水解释放活性基团(如羧酸和酚羟基), 在生物体系中表现出潜在的酶抑制或信号调节作用。氰基和氟原子的引入增强了其与生物大分子的相互作用能力, 使其在药物化学和分子探针开发中具有重要价值。其结构特性也为液晶材料或高分子聚合物的改性提供了可能。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发领域, 本品可作为激酶抑制剂或抗菌剂的合成前体。材料科学中, 用于制备具有特殊光电性能的液晶化合物。此外, 在农用化学品开发中, 可作为杀虫剂或除草剂的中间体。实验室中亦用于研究酯酶活性或氟代芳烃的反应机理。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于-20°C 至 4°C 的干燥环境中, 避免光照和潮湿。开封后需充惰性气体保护以延长稳定性。使用时应在通风橱中操作, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解推荐使用二甲基亚砜(DMSO)或四氢呋喃(THF)等有机溶剂。

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。安全数据表明其对眼睛和皮肤有刺激性, 操作时需佩戴防护手套及护目镜。若意外接触, 立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应按照国家危险化学品规范处置。

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并开展小试验证。