

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

产品图片未找到

产品基本信息

属性	值
化学名称	Benzoic acid, 4-heptyl-, 4-cyano-3-fluorophenyl ester
产品目录号	
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-庚基苯甲酸-4-氰基-3-氟苯酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 4-庚基苯甲酸-4-氰基-3-氟苯酯 (Benzoic acid, 4-heptyl-, 4-cyano-3-fluorophenyl ester), CAS 号为 86776-54-7, 分子式为 C₂₁H₂₂FN₂O₂, 分子量 339.403。该化合物为高纯度有机酯类衍生物, 纯度经 HPLC 验证大于 96%, 常温下呈白色至类白色结晶或粉末状, 具有芳香气味。其结构中含氰基、氟原子及长链烷基, 赋予其独特的极性与疏水性平衡, 易溶于有机溶剂如 DMSO、甲醇和乙醚, 但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

作为苯甲酸酯类衍生物, 该化合物可通过酯键水解调控活性分子释放, 其氰基和氟原子的引入增强了电子亲和力与代谢稳定性。在生物体系中, 这类结构常作为酶抑制剂或受体配体的关键药效团, 尤其在神经信号传导和炎症介质调控研究中具有潜在价值。其长链烷基特性还可用于模拟生物膜脂质环境, 在膜蛋白研究中作为探针分子。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于医药研发与材料科学领域。在药物化学中, 可作为先导化合物用于抗炎、抗菌或中枢神经系统药物的结构优化; 在材料领域, 其氟代芳环结构可用于液晶材料的合成或高分子聚合物的改性。此外, 在分析化学中可用作 HPLC 或 GC-MS 的内标物, 或作为荧光标记物的合成前体。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于-20℃至 4℃的干燥环境中, 避免光照与湿气。开封后需充惰性气体保护以延长稳定性。使用时应佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩, 在通风橱中操作。溶解推荐使用无水级有机溶剂, 若用于生物实验需预先进行无菌过滤。长期储存建议定期检测纯度 (每 12 个月)。

5. 质量控制与安全信息

本产品经质谱 (MS) 和核磁共振 (NMR) 验证结构, 批次间一致性控制在 $\pm 1\%$ 偏差内。根据 GHS 分类, 对皮肤和眼睛有轻微刺激性 (类别 2), 使用后需彻底冲洗接触部位。废弃处理需遵循当地危险化学品管理条例, 不可直接排入下水道。安全数据表 (SDS) 可随货提供或通过官方渠道获取。