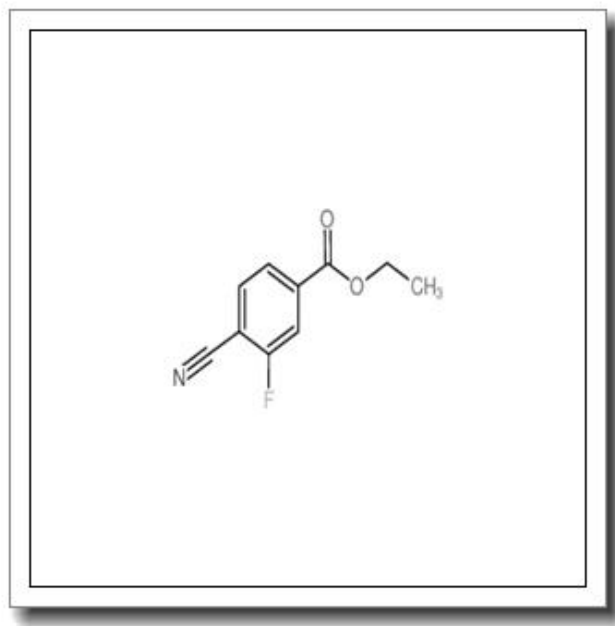


3-氟-4-氰基苯甲酸乙酯

Ethyl 4-Cyano-3-Fluorobenzoate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Ethyl 4-Cyano-3-Fluorobenzoate
中文名称	3-氟-4-氰基苯甲酸乙酯
CAS 号	952183-53-8
分子式	C ₁₀ H ₈ FN ₂ O ₂
分子量	193.174
纯度	≥ 96%

产品说明

3-氟-4-氰基苯甲酸乙酯 (Ethyl 4-Cyano-3-Fluorobenzoate) 产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 3-氟-4-氰基苯甲酸乙酯，CAS 号为 952183-53-8，分子式 $C_{10}H_8FN_2$ ，分子量 193.174。纯度 $\geq 96\%$ ，具有明确的氟代芳香环和氰基酯结构，熔点为 $78-82^{\circ}C$ ，易溶于有机溶剂如甲醇、乙醇和二氯甲烷，微溶于水。其结构中的氟原子和氰基赋予其独特的电子效应和反应活性。

2. 生物化学功能与重要性

作为含氟芳香族化合物，本品在生物化学领域具有显著的应用价值。氟原子的引入可增强化合物的代谢稳定性和脂溶性，而氰基酯基团可作为关键中间体参与亲核取代或还原反应。这类结构常见于药物分子设计中，用于调节靶标蛋白结合能力或改善药代动力学性质。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于医药和农药中间体合成，尤其适用于构建含氟杂环或芳基羧酸衍生物。在抗肿瘤、抗感染药物研发中，可作为 EGFR 抑制剂或抗菌剂的合成前体。此外，在材料科学中可用于液晶单体或特种聚合物的改性。

4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中，避光、防潮，温度控制在 $2-8^{\circ}C$ 。长期保存建议充氮保护。使用时需在通风橱中操作，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试推荐使用无水 DMF 或 THF 溶剂。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC 和 NMR 严格检测纯度及杂质含量，批次间偏差 $\leq 1\%$ 。本品对眼睛和呼吸道有刺激性，操作时应佩戴防护手套和护目镜。若发生泄漏，需用惰性吸附材料处理。废弃物需按危险化学品规范处置。

(注：本说明基于现有实验数据编制，具体应用需结合用户工艺验证。)