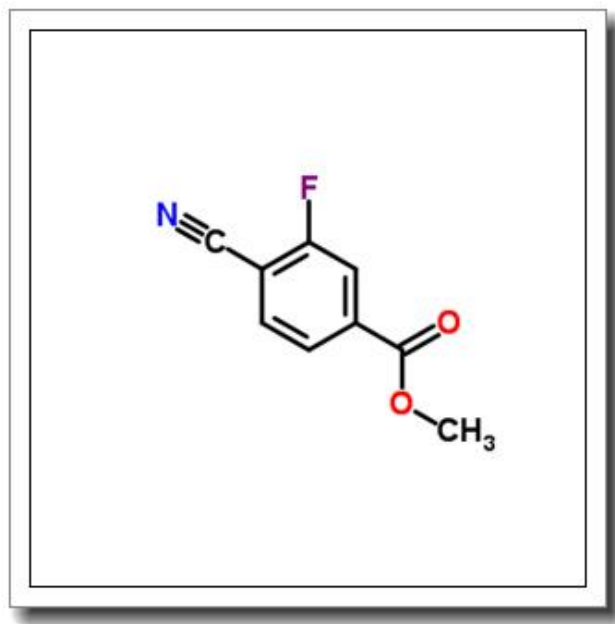


# 4-氰基-3-氟苯甲酸甲酯

*methyl 4-cyano-3-fluorobenzoate*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	methyl 4-cyano-3-fluorobenzoate
中文名称	4-氰基-3-氟苯甲酸甲酯
CAS 号	268734-34-5
分子式	C <sub>9</sub> H <sub>6</sub> FN <sub>2</sub> O <sub>2</sub>
分子量	179.148
纯度	≥ 96%

## 产品说明

### 4-氰基-3-氟苯甲酸甲酯产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

4-氰基-3-氟苯甲酸甲酯 (methyl 4-cyano-3-fluorobenzoate) 是一种芳香族羧酸酯类化合物，化学式为  $C_9H_6FN_2O_2$ ，分子量为 179.148。其 CAS 号为 268734-34-5，外观通常为白色至类白色结晶或粉末。该化合物结构中同时含有氰基 (-CN) 和氟原子 (-F) 取代基，赋予其独特的电子效应和反应活性。纯度标准为  $\geq 96\%$ ，适用于高要求的合成与研发用途。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为苯甲酸酯衍生物，该化合物在有机合成中表现出显著的活性，尤其是作为医药中间体或材料科学前体。氰基和氟原子的引入增强了其参与亲核取代、偶联反应等能力，在构建杂环化合物或功能化分子中具有重要价值。其结构特性使其在药物分子设计中常用于调节脂溶性、代谢稳定性和生物活性。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本产品广泛应用于医药、农药及材料科学领域。在医药研发中，可作为抗肿瘤、抗感染药物合成的关键中间体；在农药化学中，用于构建含氟高效杀虫剂或除草剂；在材料领域，可作为液晶单体或高分子材料的改性单元。具体实验用途包括 Suzuki 偶联、酯水解反应及进一步官能团转化。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于干燥、避光环境中，长期储存温度应控制在  $2-8^{\circ}C$ 。开封后需充惰性气体保护以防止吸潮或降解。使用时应佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明其易溶于二氯甲烷、DMF 等有机溶剂，实验时需在通风橱中操作。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC、NMR 及质谱进行严格质量控制，确保批次间稳定性。安全数据表明，其急性毒性 (LD50) 需参考具体实验数据，但需避免吞咽或长时间暴露。废弃

物处理应遵循危险化学品处置规范，不可直接排入环境。如发生泄漏，需用惰性吸附材料收集并交由专业机构处理。

注：以上信息基于现有研究数据，具体应用需结合实验条件进一步验证。