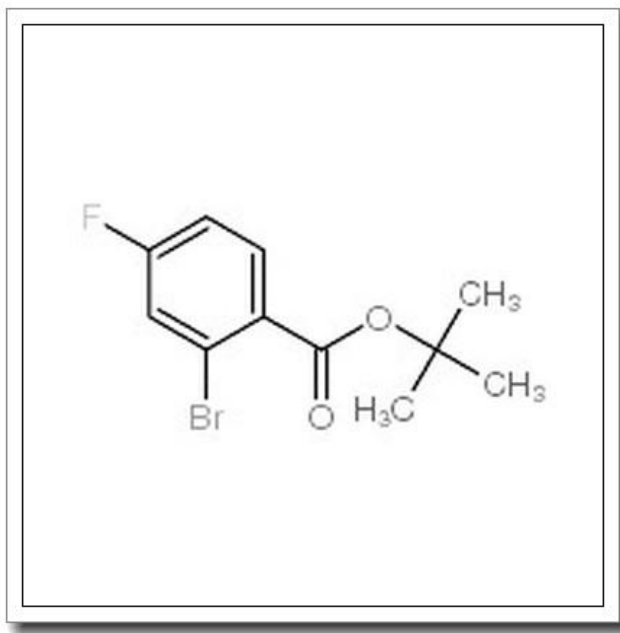


## 2-溴-4-氟苯甲酸叔丁酯

*tert-Butyl 2-bromo-4-fluorobenzoate*



### 产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-Butyl 2-bromo-4-fluorobenzoate
中文名称	2-溴-4-氟苯甲酸叔丁酯
CAS 号	951884-50-7
分子式	C <sub>11</sub> H <sub>12</sub> BrF <sub>02</sub>
分子量	275.114
纯度	>96%

## 产品说明

### 2-溴-4-氟苯甲酸叔丁酯产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

2-溴-4-氟苯甲酸叔丁酯 (tert-Butyl 2-bromo-4-fluorobenzoate) 是一种有机溴化物, 化学式为  $C_{11}H_{12}BrFO_2$ , 分子量 275.114, CAS 号为 951884-50-7。该化合物为白色至类白色结晶或粉末, 纯度高于 96%, 具有芳香气味。其结构中的溴和氟取代基赋予其较高的反应活性, 叔丁酯基团则增强了化合物的稳定性和溶解性, 适用于多种有机合成反应。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为芳基卤化物, 2-溴-4-氟苯甲酸叔丁酯是重要的有机合成中间体, 尤其在过渡金属催化的偶联反应 (如 Suzuki 偶联、Buchwald-Hartwig 胺化) 中表现突出。溴原子可作为反应位点参与碳-碳键或碳-杂原子键的形成, 而氟原子的引入能够调节化合物的电子效应和脂溶性, 在药物化学中常用于先导化合物的结构修饰。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

该产品广泛应用于医药、农药及材料科学领域。在药物研发中, 常用于构建含氟芳环结构, 以优化候选药物的代谢稳定性和生物利用度。在农药合成中, 可作为杀菌剂或除草剂的中间体。此外, 在高分子材料领域, 可用于合成功能性单体或光敏材料。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于干燥、避光的惰性环境中, 储存温度 2-8°C。长期存放需充入氮气保护以防止氧化。使用时应佩戴防护手套、护目镜及防毒面具, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明, 该化合物易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂, 反应体系需严格无水操作以确保产率。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度  $\geq 96\%$ , 并提供完整的 COA (质量分析证书)。其 GHS 危害分类包括皮肤刺激 (类别 2)、眼睛刺激 (类别 2A) 和特异性靶器官毒性 (单次

接触，类别 3)。泄漏处理需使用惰性吸附材料收集，废弃处置应遵循当地法规。运输时需贴有腐蚀性和刺激性标签，UN 编号参考同类卤代芳烃标准。

注：以上信息仅供科研用途，不可用于诊断或治疗。具体实验方案请结合文献方法优化。