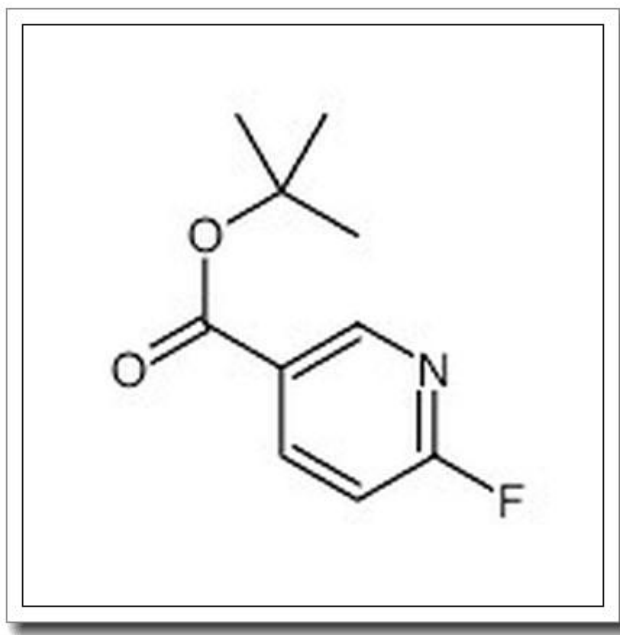


6-氟烟酸叔丁酯

tert-butyl 6-fluoropyridine-3-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-butyl 6-fluoropyridine-3-carboxylate
中文名称	6-氟烟酸叔丁酯
CAS 号	676560-01-3
分子式	C ₁₀ H ₁₂ FN ₂ O ₂
分子量	197.206
纯度	>96%

产品说明

6-氟烟酸叔丁酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

6-氟烟酸叔丁酯 (tert-butyl 6-fluoropyridine-3-carboxylate) 是一种重要的含氟吡啶类化合物，化学式为 C₁₀H₁₂FN₂O₂，分子量为 197.206，CAS 号为 676560-01-3。该化合物以叔丁酯形式存在，具有较高的化学稳定性，纯度标准大于 96%。其结构中的氟原子和吡啶环赋予其独特的电子效应和空间位阻，使其在有机合成和药物化学中具有广泛的应用潜力。

2. 生物化学功能与重要性

6-氟烟酸叔丁酯作为含氟杂环化合物，其氟原子的引入可显著改变分子的极性、脂溶性和生物活性。吡啶环作为常见的药效团，能够参与氢键形成和金属配位，而叔丁酯基团则提供了良好的水解稳定性。这类化合物在药物设计中常用于优化先导化合物的代谢稳定性和靶标结合能力，尤其在抗肿瘤、抗感染和中枢神经系统药物研发中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于医药中间体和有机合成领域。在药物研发中，它是合成含氟吡啶类活性分子的关键砌块，例如用于制备激酶抑制剂或 G 蛋白偶联受体调节剂。在材料科学中，可作为液晶材料或功能高分子的改性单体。实验室中常用于研究氟代吡啶类化合物的反应性，如 Suzuki 偶联、Buchwald-Hartwig 胺化等交叉偶联反应。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C 至 4° C 的干燥惰性气体（如氮气）环境下避光保存，长期储存需置于密封容器中。使用前需恢复至室温以避免结露。操作时应在通风良好的化学通风橱中进行，避免与强氧化剂或强酸接触。溶解性测试表明，该化合物易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂，微溶于水。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度大于 96%，并提供完整的 COA（质量分析证书）。安全数

据表明, 该化合物可能对眼睛和皮肤有刺激性, 操作时需佩戴防护眼镜、手套和实验服。如发生接触, 应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应按照危险化学品处理规范处置。运输分类为非危险品, 但建议避免剧烈震动和高温环境。

注: 具体实验方案请参考最新文献或咨询专业技术支持。本说明基于现有研究数据, 实际应用前建议进行小试验证。