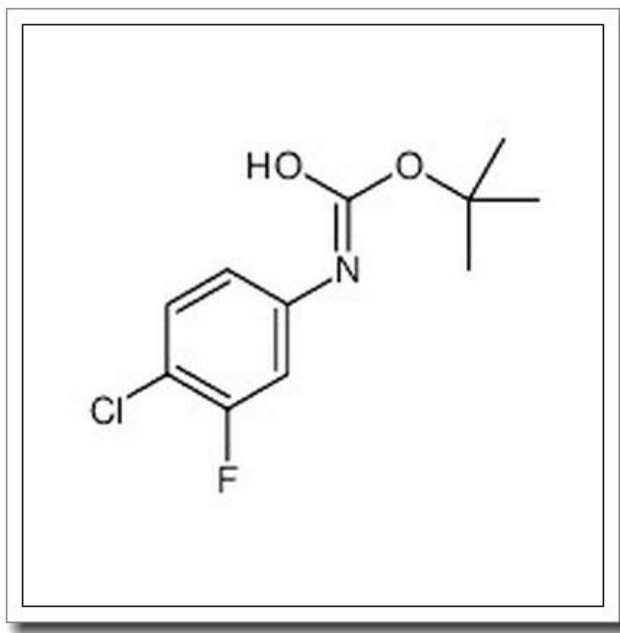


N-Boc-3-氟-4-氯苯胺

tert-butyl N-(4-chloro-3-fluorophenyl)carbamate



产品基本信息

| 属性 | 值 |
|-------|--|
| 化学名称 | <i>tert-butyl N-(4-chloro-3-fluorophenyl)carbamate</i> |
| 中文名称 | N-Boc-3-氟-4-氯苯胺 |
| CAS 号 | 869299-68-3 |
| 分子式 | C ₁₁ H ₁₃ ClFN ₂ O ₂ |
| 分子量 | 245.678 |
| 纯度 | >96% |

产品说明

1. 产品概述与化学特性

tert-butyl N-(4-chloro-3-fluorophenyl)carbamate (N-Boc-3-氟-4-氯苯胺) 是一种重要的有机中间体, 化学式为 $C_{11}H_{13}ClFN_2O_2$, 分子量为 245.678, CAS 号为 869299-68-3。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 纯度通常高于 96%。其结构中含有 Boc 保护基 (叔丁氧羰基) 以及氯和氟取代的苯环, 使其在有机合成中表现出较高的反应活性和选择性。该化合物在常温下稳定, 但需避免与强酸、强碱或氧化剂接触。

2. 生物化学功能与重要性

N-Boc-3-氟-4-氯苯胺在生物化学和药物化学中具有重要价值。Boc 保护基的存在使其成为胺类化合物合成的关键中间体, 尤其在多肽和酰胺类药物的制备中广泛应用。氟和氯原子的引入可显著改变分子的电子分布和生物活性, 使其在药物设计中用于优化化合物的代谢稳定性和靶标结合能力。

3. 主要应用领域与具体用途

该化合物主要用于医药和农药领域。在医药研发中, 它是合成抗肿瘤、抗病毒和中枢神经系统药物的重要砌块。例如, 可用于制备含氟喹诺酮类抗生素或激酶抑制剂。在农药领域, 其作为中间体用于合成高效低毒的杀虫剂和除草剂。此外, 在材料科学中, 它也可用于功能性高分子材料的改性。

4. 储存条件与使用建议

建议将产品密封保存于干燥、阴凉的环境中, 避免光照和潮湿, 储存温度以 2-8°C 为宜。开封后应充入惰性气体 (如氮气) 以延长稳定性。使用时需在通风橱中操作, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明, 该化合物易溶于二氯甲烷、DMF 等有机溶剂, 难溶于水。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测, 纯度均一性控制在 96% 以上, 并符合相关化学品标准。安全数据表明, 该物质对眼睛和皮肤有刺激性, 操作时应佩戴防护手套、护目镜和实

验服。若不慎接触，需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，避免环境污染。

以上信息基于现有实验数据，具体应用需结合实际研究需求进一步验证。