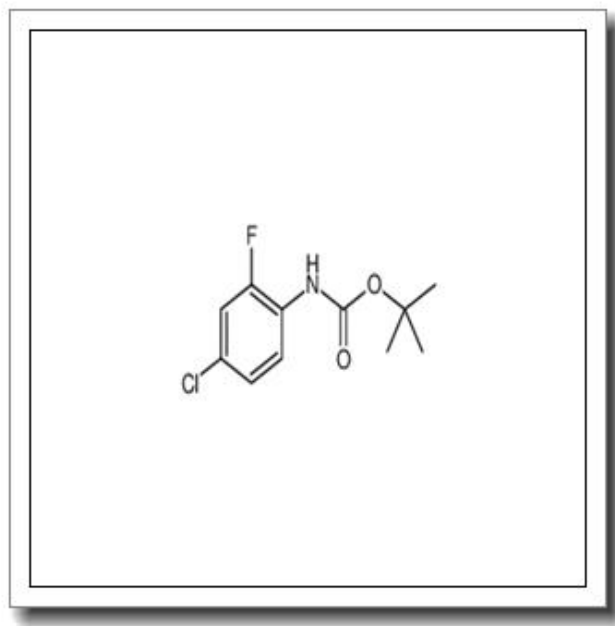


(4-氯-2-氟-苯基)-氨基甲酸叔丁基酯

Carbamic acid, N-(4-chloro-2-fluorophenyl)-, 1,1-dimethylethyl ester



产品基本信息

属性	值
化学名称	Carbamic acid, N-(4-chloro-2-fluorophenyl)-, 1,1-dimethylethyl ester
中文名称	(4-氯-2-氟-苯基)-氨基甲酸叔丁基酯
CAS 号	956828-47-0
分子式	C ₁₁ H ₁₃ ClFN ₂ O ₂
分子量	245.678
纯度	≥96%

产品说明

产品名称: (4-氯-2-氟-苯基)-氨基甲酸叔丁基酯 (Carbamic acid, N-(4-chloro-2-fluorophenyl)-, 1,1-dimethylethyl ester)

1. 产品概述与化学特性

本品为白色至类白色结晶性粉末, 化学名为 N-(4-氯-2-氟苯基)氨基甲酸叔丁酯, CAS 号为 956828-47-0, 分子式 $C_{11}H_{13}ClFN_2O_2$, 分子量 245.678。其纯度 $\geq 96\%$, 结构中含有氯、氟取代基及叔丁氧羰基 (Boc) 保护基团, 具有较高的化学稳定性和反应活性。该化合物在常温下稳定, 易溶于有机溶剂如二氯甲烷、乙酸乙酯, 微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为氨基甲酸酯类衍生物, 本品在有机合成中常用于氨基保护反应, 其 Boc 基团可在酸性条件下脱除, 广泛应用于多肽合成和药物中间体制备。氟和氯原子的引入增强了分子的电子效应, 使其成为构建含卤素杂环化合物的重要前体, 在药物分子设计中具有显著价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于医药研发领域, 是合成抗肿瘤、抗病毒及中枢神经系统药物的重要中间体。具体可用于:

- 蛋白酶抑制剂类药物的结构修饰
- 含氟喹诺酮类抗生素的合成
- 农药活性分子的卤代苯胺片段构建

实验室中亦用于研究芳基氨基甲酸酯类化合物的水解动力学及酶催化反应。

4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中, 置于干燥、避光、 -20°C 至 4°C 环境下, 避免与强酸、强氧化剂接触。使用时需在惰性气体 (如氮气) 保护下操作, 建议佩戴防护手套、护目镜及防毒面具。溶解性测试推荐优先使用 DMF 或 THF 溶剂。

5. 质量控制与安全信息

本品通过 HPLC 检测纯度，批号关联 COA 报告。安全数据表明其对眼睛和皮肤有刺激性，操作时应遵守 GHS 标准：

- 危险标识：H315（造成皮肤刺激）、H319（造成严重眼刺激）
 - 应急处理：接触后立即用大量清水冲洗，吸入时转移至通风处
- 废弃物处置需符合当地法规，不可直接排入下水道。

注：本说明基于现有研究数据，实际应用前请查阅最新文献并开展小试验证。