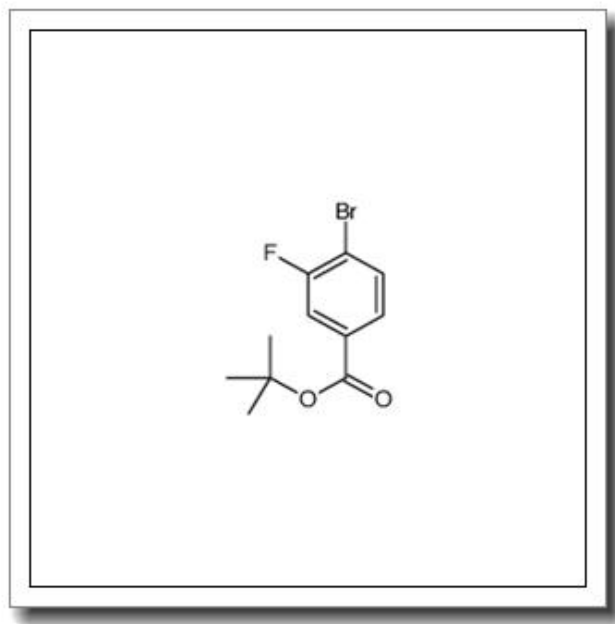


4-溴-3-氟苯甲酸叔丁酯

tert-butyl 4-bromo-3-fluorobenzoate



产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-butyl 4-bromo-3-fluorobenzoate
中文名称	4-溴-3-氟苯甲酸叔丁酯
CAS 号	1057961-75-7
分子式	C ₁₁ H ₁₂ BrF ₀₂
分子量	275.114
纯度	≥96%

产品说明

4-溴-3-氟苯甲酸叔丁酯产品说明

1. 产品概述与化学特性

4-溴-3-氟苯甲酸叔丁酯 (tert-butyl 4-bromo-3-fluorobenzoate) 是一种有机芳香族化合物, CAS 号为 1057961-75-7, 分子式为 $C_{11}H_{12}BrFO_2$, 分子量为 275.114。该化合物为白色至类白色结晶或粉末, 纯度通常 $\geq 96\%$ 。其结构中的溴和氟取代基赋予其较高的反应活性, 而叔丁酯基团则提供了良好的溶解性和稳定性, 适合作为有机合成中间体。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物在生物化学领域主要作为关键合成中间体, 用于构建更复杂的分子结构。溴和氟原子的引入可显著改变母体分子的电子效应和空间位阻, 从而影响其与生物靶标的相互作用。这类结构修饰在药物化学中尤为重要, 常用于优化候选化合物的代谢稳定性和生物活性。

3. 主要应用领域与具体用途

4-溴-3-氟苯甲酸叔丁酯广泛应用于医药研发和材料科学领域。在医药领域, 它是合成抗肿瘤、抗炎及中枢神经系统药物的重要中间体。在材料科学中, 可用于制备含氟液晶单体或高性能聚合物。此外, 其高反应性也适用于钯催化的偶联反应 (如 Suzuki 偶联), 以构建更复杂的芳香族体系。

4. 储存条件与使用建议

本品需密封保存于干燥、阴凉处, 推荐温度为 $2-8^{\circ}C$, 避免光照和潮湿环境。开封后应充惰性气体 (如氮气) 保护以延长稳定性。使用时应穿戴防护手套、护目镜和实验服, 在通风橱中操作, 避免吸入粉尘或接触皮肤。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和 NMR 严格检测, 确保纯度 $\geq 96\%$ 。安全信息方面, 该化合物可能对眼睛、皮肤和呼吸系统造成刺激, 操作时需遵循 GHS 标准:

- 危险类别: 刺激性物质 (H315-H319)

- 安全措施: 如接触皮肤, 立即用大量清水冲洗; 若吸入, 移至空气新鲜处并就医。

废弃物处置需符合当地环保法规, 建议交由专业化学品回收机构处理。

(全文共 436 字)