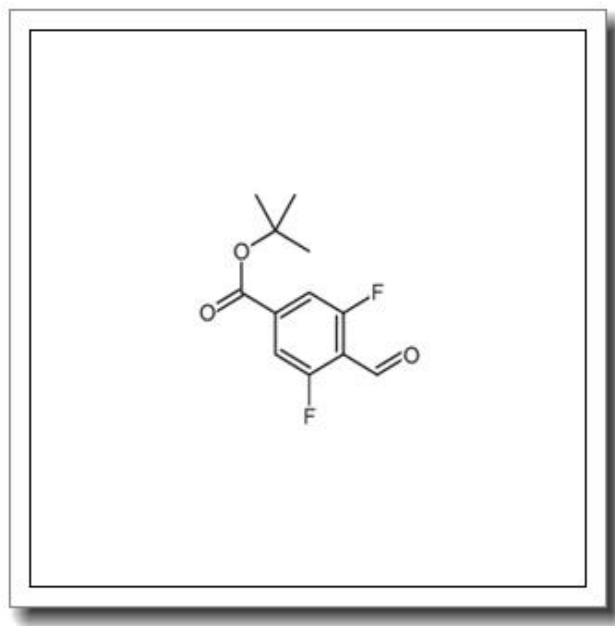


4-甲酰基-3,5-二氟苯甲酸叔丁酯

tert-butyl 3,5-difluoro-4-formylbenzoate



产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-butyl 3,5-difluoro-4-formylbenzoate
中文名称	4-甲酰基-3,5-二氟苯甲酸叔丁酯
CAS 号	467442-12-2
分子式	C ₁₂ H ₁₂ F ₂ O ₃
分子量	242.219
纯度	≥96%

产品说明

4-甲酰基-3,5-二氟苯甲酸叔丁酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

4-甲酰基-3,5-二氟苯甲酸叔丁酯 (tert-butyl 3,5-difluoro-4-formylbenzoate) 是一种含氟芳香族化合物, 化学式为 $C_{12}H_{12}F_2O_3$, 分子量 242.219, CAS 号为 467442-12-2。该化合物以白色至类白色结晶或粉末形式存在, 纯度 $\geq 96\%$, 具有独特的氟代苯甲酸酯结构, 兼具醛基的活泼性和叔丁酯基的稳定性, 在有机合成中表现出优异的反应选择性。

2. 生物化学功能与重要性

作为多功能合成砌块, 其分子中的甲酰基 (-CHO) 可参与缩合、还原胺化等反应, 而氟原子的强电负性可显著调节苯环电子云密度, 增强产物生物活性。在药物化学中, 氟取代常被用于提高化合物的代谢稳定性和膜穿透性, 因此该产品是构建抗肿瘤、抗感染等药物活性分子的关键中间体。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品广泛应用于医药研发和材料科学领域。在医药领域, 常用于合成含氟靶向药物 (如激酶抑制剂) 及 PET 显影剂前体; 在材料领域, 可作为液晶材料或高分子单体的修饰基团。具体用途包括但不限于:

- 通过 Suzuki 偶联反应构建联芳基结构
- 作为醛组分参与 Wittig 反应合成烯烃衍生物
- 经还原胺化制备含氟生物活性胺类化合物

4. 储存条件与使用建议

建议在惰性气体保护下密封储存, 温度控制在 $2-8^{\circ}C$, 避光防潮。开封后需充氮保存, 避免反复冻融。使用时应佩戴防护手套、护目镜, 在通风橱中操作。溶解性测试表明易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂, 推荐使用前通过 TLC 或 HPLC 监测纯度。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，残留溶剂符合 ICH 标准。MSDS 数据显示其具有刺激性，接触皮肤可能引起红肿，操作时需穿戴防护装备。废弃物应作为有害化学品处理，避免直接排放。运输分类为非危险品，但需符合一般化学品运输规范。

注：本说明基于现有实验数据编制，具体应用需结合用户工艺条件验证。更多技术参数可联系技术支持获取。