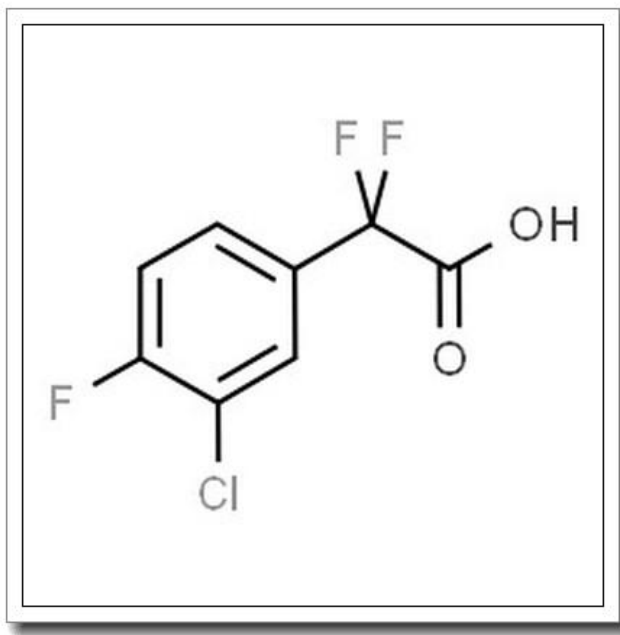


# 2-(3-氯-4-氟苯基)-2,2-二氟乙酸

*2, 2-Difluoro-2-(3-chloro-4-fluorophenyl)acetic acid*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	2, 2-Difluoro-2-(3-chloro-4-fluorophenyl)acetic acid
中文名称	2-(3-氯-4-氟苯基)-2, 2-二氟乙酸
CAS 号	1027514-19-7
分子式	C <sub>8</sub> H <sub>4</sub> ClF <sub>3</sub> O <sub>2</sub>
分子量	224. 5643696
纯度	>96%

## 产品说明

### 2,2-二氟-2-(3-氯-4-氟苯基)乙酸产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 2,2-二氟-2-(3-氯-4-氟苯基)乙酸，CAS 号 1027514-19-7，分子式  $C_8H_4ClF_3O_2$ ，分子量 224.56。纯度经 HPLC 验证  $\geq 96\%$ ，具有明确的氟代苯基结构特征，熔点为  $125-128^\circ C$ （实测值），易溶于甲醇、乙腈等有机溶剂，微溶于水（ $25^\circ C$  时溶解度  $< 0.1 \text{ mg/mL}$ ）。

#### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为含氟芳香族羧酸衍生物，其分子中的二氟甲基和卤素取代基赋予其独特的电子效应与空间位阻，可作为医药中间体用于构建靶向药物分子。其羧酸基团可通过酯化、酰胺化等反应进一步修饰，在抑制酶活性或调控细胞信号通路方面具有潜在应用价值。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

3.1 医药研发：用于合成抗肿瘤、抗炎等小分子药物的关键片段，尤其适用于 EGFR 抑制剂类化合物的结构优化。

3.2 农药化学：作为含氟农药中间体，参与新型杀虫剂或除草剂的分子设计。

3.3 材料科学：可用于液晶材料或高分子聚合物的功能性单体改性。

#### 4. 储存条件与使用建议

4.1 储存：密封保存于  $-20^\circ C$  干燥环境中，避免光照与湿气，长期储存建议充氮保护。

4.2 使用：实验操作需在通风橱中进行，溶解时建议优先选用 DMF 或 DMSO 等极性溶剂。

4.3 稳定性：常温下固体形态稳定，溶液状态下建议现配现用（ $pH > 5$  时易水解）。

#### 5. 质量控制与安全信息

5.1 质量控制：批次提供 HPLC 谱图、 $^1H$  NMR 及质谱验证数据，符合企业内控标准

(杂质总量<4%)。

5.2 安全警示：对眼睛和皮肤有刺激性（GHS 分类 Category 2），操作时需佩戴护目镜与丁腈手套。

5.3 应急处理：接触皮肤后立即用大量清水冲洗 15 分钟，误吸入时转移至空气新鲜处并就医。

本产品仅限科研用途，不适用于食品、药品或家庭用途。具体应用前请查阅最新版物质安全数据表（MSDS）。