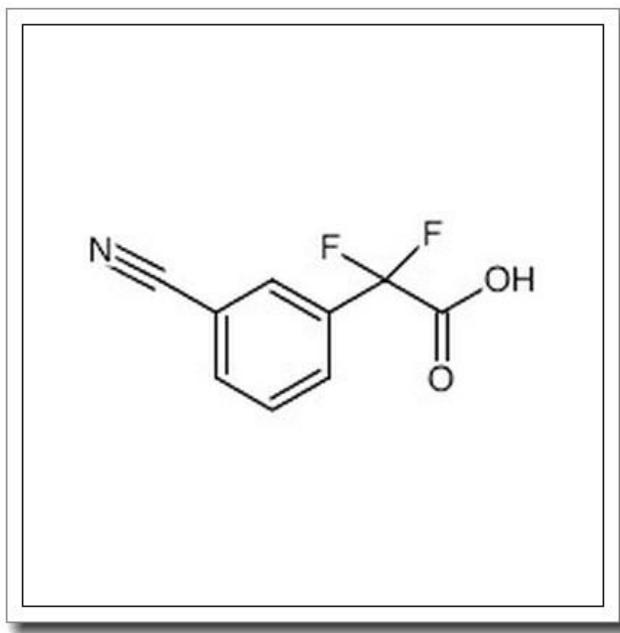


2-(3-氰基苯基)-2,2-二氟乙酸

2-(3-cyanophenyl)-2,2-difluoroacetic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-(3-cyanophenyl)-2,2-difluoroacetic acid
中文名称	2-(3-氰基苯基)-2,2-二氟乙酸
CAS 号	1249974-01-3
分子式	C ₉ H ₅ F ₂ N ₂ O ₂
分子量	197.138
纯度	>96%

产品说明

产品说明

1. 产品概述与化学特性

2-(3-氰基苯基)-2,2-二氟乙酸 (化学名称: 2-(3-cyanophenyl)-2,2-difluoroacetic acid) 是一种含氟有机化合物, CAS 号为 1249974-01-3, 分子式为 $C_9H_5F_2N_2O_2$, 分子量为 197.138。该化合物以白色至类白色固体形式存在, 纯度高于 96%, 具有显著的酸性和极性特性。其结构中的氰基和二氟甲基官能团赋予其独特的化学反应性, 适用于多种有机合成和药物研发场景。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物在生物化学研究中具有重要作用, 尤其是作为中间体用于合成含氟药物分子。二氟甲基的引入可以显著改善化合物的代谢稳定性和生物利用度, 而氰基则提供了进一步衍生化的位点。其在药物化学中的应用尤为突出, 常用于构建具有潜在生物活性的杂环化合物或靶向分子。

3. 主要应用领域与具体用途

2-(3-氰基苯基)-2,2-二氟乙酸广泛应用于医药研发、农药合成和材料科学领域。

具体用途包括:

- 作为关键中间体用于合成含氟药物候选分子, 如抗肿瘤或抗炎药物。
- 用于构建具有特殊电子效应的有机材料, 如液晶或光电材料。
- 在农药化学中用于开发高效低毒的含氟农药。

4. 储存条件与使用建议

该化合物需在干燥、避光的环境中储存, 推荐温度为 2-8°C, 长期保存建议置于惰性气体保护下。使用时应避免与强氧化剂或强碱接触, 操作过程中需佩戴防护手套和护目镜, 确保通风良好。溶解性测试表明, 其易溶于极性有机溶剂 (如 DMF、DMSO), 微溶于水。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测, 纯度 >96%, 并提供详细的质量分析报告 (COA)。安全信息

如下:

- 可能对眼睛、皮肤和呼吸道造成刺激，操作时需采取适当防护措施。
- 如不慎接触，立即用大量清水冲洗并就医。
- 废弃物处理需符合当地环保法规，避免直接排放。

以上信息仅供参考，具体实验条件需根据实际需求优化。