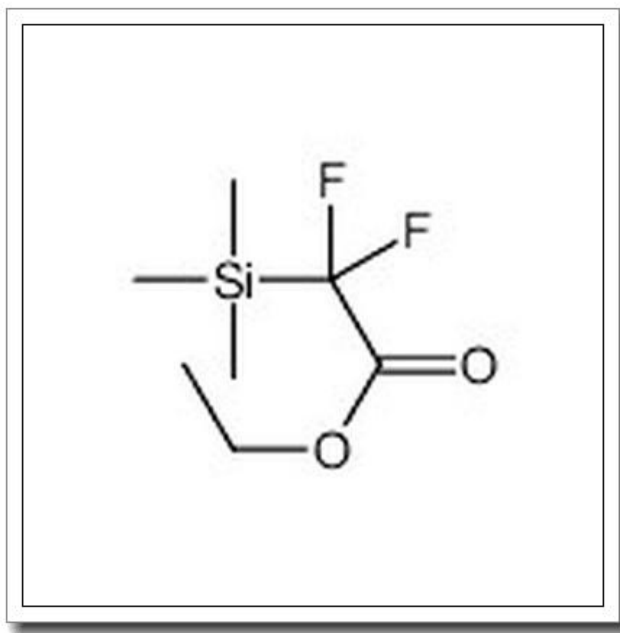


2-(三甲基硅基)-2,2-二氟乙酸乙酯

ethyl 2,2-difluoro-2-trimethylsilylacetate



产品基本信息

属性	值
化学名称	ethyl 2,2-difluoro-2-trimethylsilylacetate
中文名称	2-(三甲基硅基)-2,2-二氟乙酸乙酯
CAS 号	205865-67-4
分子式	C ₇ H ₁₄ F ₂ O ₂ Si
分子量	196.267
纯度	>96%

产品说明

2-(三甲基硅基)-2,2-二氟乙酸乙酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本品化学名称为 ethyl 2,2-difluoro-2-trimethylsilylacetate, 中文名 2-(三甲基硅基)-2,2-二氟乙酸乙酯, CAS 号 205865-67-4, 分子式 $C_7H_{14}F_2O_2Si$, 分子量 196.267。该化合物为无色至淡黄色透明液体, 纯度 >96%, 具有硅烷保护基团与二氟甲基的独特结构, 易溶于多数有机溶剂如二氯甲烷、乙醚和四氢呋喃, 但在水中稳定性较差。其硅基与氟原子的协同效应使其成为有机合成中的重要中间体。

2. 生物化学功能与重要性

作为含氟硅烷衍生物, 本品在生物活性分子修饰中表现出显著优势。二氟甲基的引入可增强化合物的代谢稳定性与脂溶性, 而三甲基硅基则提供位点选择性保护功能。这类结构单元广泛用于药物设计, 尤其是抗肿瘤、抗病毒靶向分子的合成, 能有效调节药物分子的电子效应与空间构象。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于以下领域:

- 3.1 医药中间体: 参与构建含氟药物分子骨架, 如蛋白酶抑制剂与激酶调节剂的合成。
- 3.2 材料科学: 作为含氟硅烷前体, 用于制备疏水涂层或特种聚合物。
- 3.3 有机合成: 在过渡金属催化反应中作为二氟卡宾等效体, 实现 C-F 键的高效构建。

4. 储存条件与使用建议

储存于惰性气体 (如氩气) 保护的密闭容器中, 温度控制在 $-20^{\circ}C$ 至 $4^{\circ}C$, 避光防潮。开封后建议一次性使用完毕, 若需分次使用, 需严格隔绝空气与水分。操作时需通风橱中进行, 佩戴防化手套与护目镜。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 >96%, GC-MS 验证结构一致性。安全数据如下:

- 5.1 危险性：对皮肤、眼睛及呼吸道有刺激性，遇强氧化剂可能发生剧烈反应。
- 5.2 应急处理：皮肤接触时立即用肥皂水冲洗 15 分钟，眼睛接触需用生理盐水冲洗并就医。
- 5.3 废弃处置：按危险化学品规范处理，不可直接排入下水道。

注：具体实验方案请参阅相关文献，使用前务必查阅最新版物质安全数据表（MSDS）。