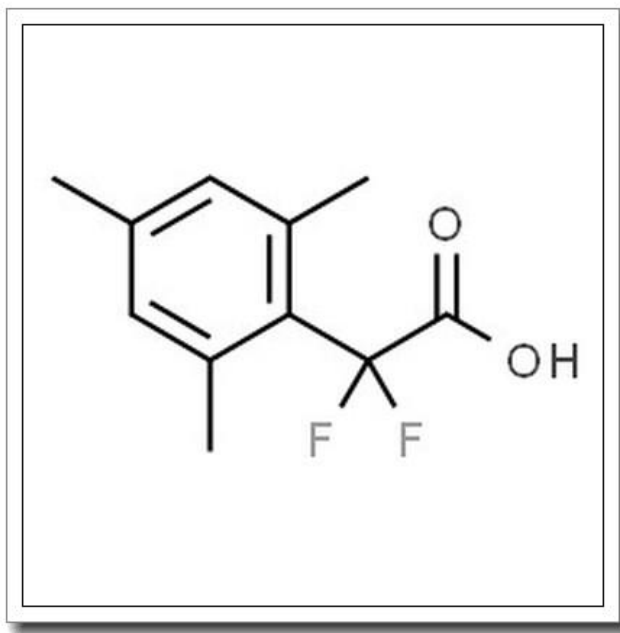


2,2-二氟-2-(2,4,6-三甲基苯基)乙酸

2,2-Difluoro-2-mesitylacetic Acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	2,2-Difluoro-2-mesitylacetic Acid
中文名称	2,2-二氟-2-(2,4,6-三甲基苯基)乙酸
CAS 号	1436389-32-0
分子式	C ₁₁ H ₁₂ F ₂ O ₂
分子量	214.21
纯度	>96%

产品说明

2, 2-二氟-2-(2, 4, 6-三甲基苯基)乙酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

2, 2-二氟-2-(2, 4, 6-三甲基苯基)乙酸 (化学名称: 2, 2-Difluoro-2-mesitylacetic Acid) 是一种含氟芳香族羧酸衍生物, CAS 号为 1436389-32-0, 分子式 $C_{11}H_{12}F_2O_2$, 分子量 214. 21。该化合物以白色至类白色结晶粉末形式存在, 纯度 $\geq 96\%$, 具有独特的氟代芳环结构, 其羧酸基团和邻位二氟取代特性赋予其显著电子效应和空间位阻, 适用于有机合成及医药中间体制备。

2. 生物化学功能与重要性

作为氟代芳基乙酸类化合物, 其分子中的氟原子可增强代谢稳定性和脂溶性, 在药物设计中常用于改善先导化合物的生物利用度。该结构单元能参与多种偶联反应 (如 Suzuki 偶联), 还可作为酶抑制剂或受体调节剂的活性片段, 在抗炎、抗肿瘤药物研发中具有潜在应用价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于以下领域:

- 医药中间体: 用于合成含氟靶向药物, 特别是激酶抑制剂类抗肿瘤化合物。
- 材料科学: 作为有机光电材料的前体, 参与构建液晶或 OLED 功能分子。
- 科研试剂: 在氟化学研究中作为标准品或反应模块, 探索 C-F 键活化机制。

4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中, 避光、防潮, 建议温度 $-20^{\circ}C$ 至 $4^{\circ}C$ 长期保存。使用前需恢复至室温并干燥处理, 避免与强氧化剂、强碱接触。溶解性测试表明其易溶于 DMF、DMSO 等极性有机溶剂, 水溶性较低 ($< 0.1 \text{ mg/mL}$), 建议配制时使用超声辅助溶解。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC (面积归一化法) 确保纯度 $\geq 96\%$, 批次间 RSD $< 1\%$ 。MS 和 1H NMR 进行结构确证。安全数据: 急性毒性 (LD50 大鼠口服) $> 500 \text{ mg/kg}$, 操作时需佩戴防护

手套/眼镜，在通风橱中进行。若接触皮肤，立即用大量清水冲洗。废弃物应作为有害化学品处置，符合当地环保法规。

（注：本说明基于现有研究数据，实际应用需结合具体实验条件验证。）