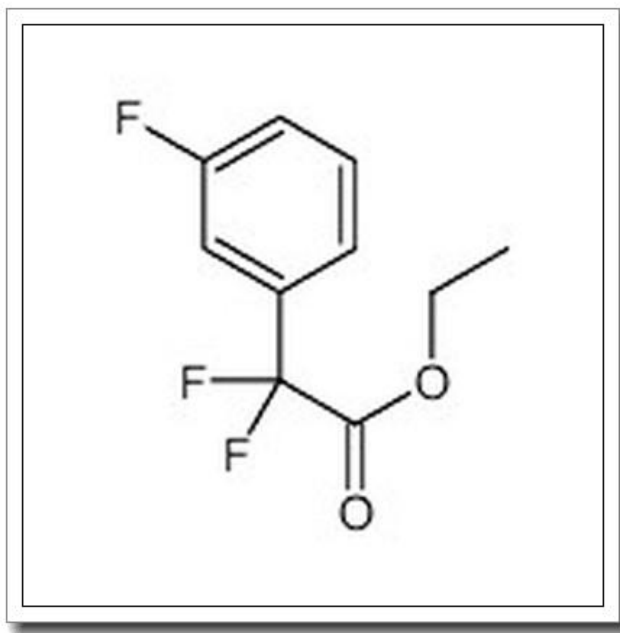


2,2-二氟-2-(3-氟苯基)乙酸乙酯

Ethyl 2,2-difluoro-2-(3-fluorophenyl)acetate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Ethyl 2,2-difluoro-2-(3-fluorophenyl)acetate
中文名称	2,2-二氟-2-(3-氟苯基)乙酸乙酯
CAS 号	698378-81-3
分子式	C ₁₀ H ₉ F ₃ O ₂
分子量	218.172
纯度	>96%

产品说明

2, 2-二氟-2-(3-氟苯基)乙酸乙酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

2, 2-二氟-2-(3-氟苯基)乙酸乙酯 (Ethyl 2, 2-difluoro-2-(3-fluorophenyl)acetate) 是一种含氟有机化合物, CAS 号为 698378-81-3, 分子式为 C₁₀H₉F₃O₂, 分子量为 218.172。本品为无色至淡黄色液体, 纯度高于 96%, 具有酯类特征性气味。其结构中包含二氟甲基和氟苯基团, 赋予其独特的化学稳定性和反应活性, 适合作为中间体参与多种有机合成反应。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物因其氟原子的强电负性和空间位阻效应, 在药物化学和材料科学中具有重要价值。氟化修饰可显著改变分子的脂溶性、代谢稳定性和生物利用度, 使其成为设计抗肿瘤、抗病毒及中枢神经系统药物的重要砌块。此外, 其酯基结构易于水解或转化, 为后续衍生化提供了灵活的反应位点。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于医药和农药中间体的合成, 尤其在含氟药物的研发中发挥关键作用。具体用途包括: 作为蛋白酶抑制剂或激酶抑制剂的合成前体; 参与构建含氟杂环化合物; 用于放射性标记化合物的制备。在材料领域, 可作为液晶或高分子材料的改性单体。

4. 储存条件与使用建议

建议在-20° C 至 4° C 的惰性气体 (如氮气) 环境中避光保存, 确保容器密封以防吸湿或氧化。使用前需恢复至室温并充分摇匀。操作时需在通风橱中进行, 佩戴防化手套、护目镜及实验服。避免与强氧化剂或强酸接触, 防止酯键水解。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC、NMR 及质谱进行严格质量控制, 确保批次间一致性。安全数据表明, 其急性毒性较低 (LD₅₀ 未明确), 但可能对眼睛和皮肤产生刺激性。若不慎接触, 应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物需按危险化学品规范处置。

注：以上信息基于现有研究数据，具体应用需进一步实验验证。