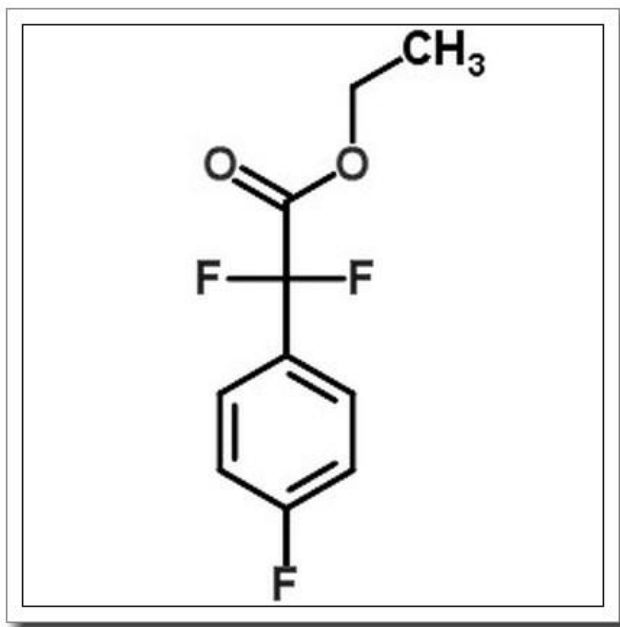


# 2,2-二氟-2-(4-氟苯基)乙酸乙酯

*ethyl α, α-difluoro-α-(p-fluorophenyl)acetate*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	ethyl α, α-difluoro-α-(p-fluorophenyl)acetate
中文名称	2,2-二氟-2-(4-氟苯基)乙酸乙酯
CAS 号	175543-23-4
分子式	C10H9F3O2
分子量	218.173
纯度	>96%

## 产品说明

### 2, 2-二氟-2-(4-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-(4-氟苯基)乙酸乙酯 (ethyl  $\alpha, \alpha$ -difluoro- $\alpha$ -(p-fluorophenyl)acetate) 是一种含氟有机化合物, CAS 号为 175543-23-4, 分子式  $C_{10}H_9F_3O_2$ , 分子量 218.173。该化合物为无色至淡黄色液体, 纯度通常高于 96%, 具有独特的  $\alpha, \alpha$ -二氟乙酸酯结构, 苯环对位的氟原子赋予其特殊的电子效应和反应活性。其酯基和双氟取代特性使其在有机合成中表现出高反应选择性。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为含氟砌块, 该化合物在药物化学和材料科学中具有重要价值。氟原子的引入可显著改善分子的脂溶性、代谢稳定性和生物膜穿透性。其  $\alpha$ -位双氟结构能模拟羧酸或酮的过渡态, 常用于酶抑制剂的设计。在生物活性分子研发中, 该结构片段可优化先导化合物的药代动力学性质。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于以下领域:

- 3.1 医药中间体: 作为关键合成子用于抗肿瘤、抗病毒及 CNS 药物研发, 尤其适用于含氟靶向药物的结构修饰。
- 3.2 农药化学: 用于构建高效含氟杀虫剂和除草剂的活性核心骨架。
- 3.3 材料科学: 作为含氟单体参与特种高分子材料的合成, 改善材料耐候性和表面性能。
- 3.4 科研试剂: 在有机氟化学研究中用于 C-F 键活化、亲核取代等机理探索。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议在惰性气体保护下密封储存, 温度控制在  $-20^{\circ}C$  至  $4^{\circ}C$ , 避光防潮。开封后需充氮保存并于 6 个月内使用完毕。实验操作应在通风橱中进行, 避免与强氧化剂、强酸强碱接触。溶解性测试表明其易溶于乙醚、THF 等有机溶剂, 推荐使用干燥溶剂配制溶液。

## 5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度  $\geq 96\%$ ，批次间偏差小于 1%。MS 和 NMR 谱图数据可随 COA 提供。安全警示：该化合物可能引起眼睛和皮肤刺激，操作时需佩戴护目镜、防化手套。若不慎接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应作为有害化学品处理，遵守当地环保法规。运输分类为 UN 1993/III，需贴腐蚀性液体标签。

（注：本说明基于现有研究数据，具体应用需结合实验验证。产品规格可能因批次调整，请以最新 COA 为准。）