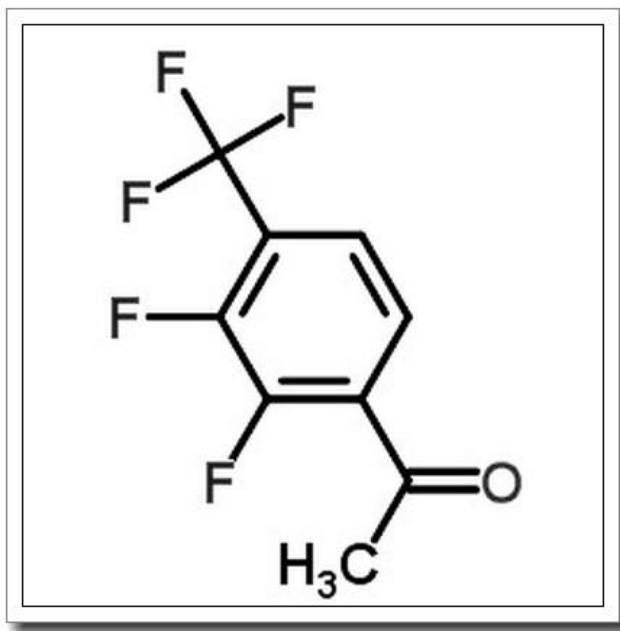


2',3'-二氟-4'-(三氟甲基)苯乙酮

1-[2,3-Difluoro-4-(trifluoromethyl)phenyl]ethanone



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-[2,3-Difluoro-4-(trifluoromethyl)phenyl]ethanone
中文名称	2',3'-二氟-4'-(三氟甲基)苯乙酮
CAS号	237761-82-9
分子式	C ₉ H ₅ F ₅ O
分子量	224.127
纯度	>96%

产品说明

1-[2,3-二氟-4-(三氟甲基)苯基]乙酮产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本品化学名称为 1-[2,3-二氟-4-(三氟甲基)苯基]乙酮 (CAS 号: 237761-82-9), 分子式 C₉H₅F₅O, 分子量 224.127, 是一种含氟芳香族酮类化合物。其结构特征为苯环上带有 2,3-位二氟取代和 4-位三氟甲基取代, 同时乙酰基与苯环直接相连。常温下为白色至类白色结晶粉末, 纯度 ≥96%, 具有低挥发性及中等极性, 易溶于有机溶剂如二氯甲烷、乙醚和丙酮, 微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物因其独特的氟原子取代模式, 表现出显著的电子效应和空间位阻, 可作为关键中间体参与亲核取代、偶联反应等有机合成过程。三氟甲基的强吸电子特性与氟原子的协同作用, 使其在修饰药物分子脂溶性和代谢稳定性方面具有重要价值, 尤其在抗肿瘤、抗病毒等药物研发中备受关注。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于医药和农药领域的高效中间体, 具体包括:

- (1) 新型含氟药物的合成, 如蛋白酶抑制剂或激酶抑制剂的结构优化;
- (2) 液晶材料及特种高分子单体的制备;
- (3) 农药活性分子 (如除草剂、杀虫剂) 的氟化修饰。实验级用途需在惰性气体保护下进行反应, 以避免乙酰基氧化。

4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中, 置于 -20°C 至 4°C 干燥避光环境, 长期保存建议充入惰性气体。使用时需佩戴防护手套、护目镜及防毒面具, 操作区域应配备通风设备。溶解性测试推荐使用无水级溶剂, 避免与水或强氧化剂接触。

5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC 检测纯度 ≥96%, 残留溶剂符合 USP 标准。安全数据表明其对皮肤和眼睛有刺激性 (GHS 分类: 刺激性类别 2), 误接触需立即用大量清水冲洗。废弃物

处置应遵循危险化学品管理条例，不可直接排入下水道。运输时需标注“有害化学品”标识，并避免与食品混装。

（注：本说明基于现有研究数据，实际应用前请查阅最新文献并开展小试验证。）