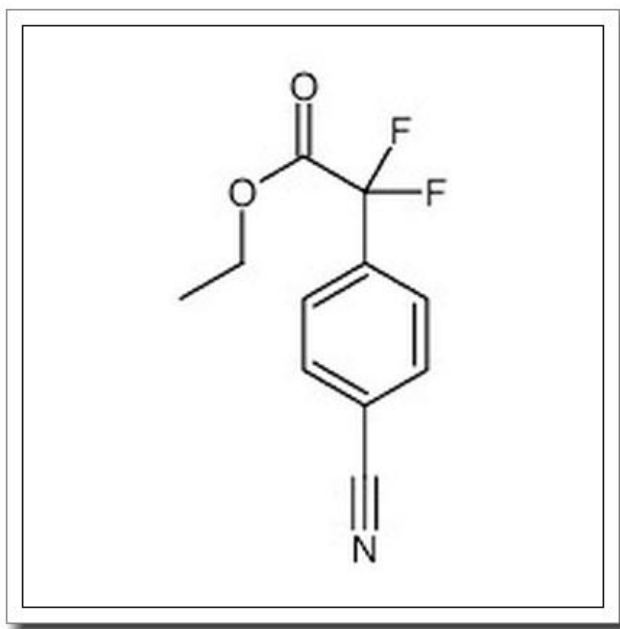


# ethyl 2-(4-cyanophenyl)-2,2-difluoroacetate

*ethyl 2-(4-cyanophenyl)-2,2-difluoroacetate*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	ethyl 2-(4-cyanophenyl)-2,2-difluoroacetate
中文名称	ethyl 2-(4-cyanophenyl)-2,2-difluoroacetate
CAS 号	854778-10-2
分子式	C <sub>11</sub> H <sub>9</sub> F <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>
分子量	225.191
纯度	>96%

## 产品说明

### 1. 产品概述与化学特性

ethyl 2-(4-cyanophenyl)-2,2-difluoroacetate (CAS 号: 854778-10-2) 是一种有机氟化合物, 分子式为  $C_{11}H_9F_2NO_2$ , 分子量为 225.191。该化合物以白色至浅黄色结晶或粉末形式存在, 纯度通常高于 96%。其结构中的氰基苯基和双氟乙酸乙酯基团赋予其独特的化学性质, 使其在有机合成和药物化学中具有重要价值。该化合物易溶于常见有机溶剂如二甲基亚砜 (DMSO)、甲醇和乙腈, 但在水中溶解度较低。

### 2. 生物化学功能与重要性

作为一种含氟有机中间体, ethyl 2-(4-cyanophenyl)-2,2-difluoroacetate 在生物活性分子的合成中扮演关键角色。氟原子的引入能够显著改变分子的电子分布和脂溶性, 从而影响其与生物靶标的相互作用。氰基苯基结构则为其提供了潜在的氢键受体能力, 使其在药物设计中可用于增强与酶或受体的结合亲和力。

### 3. 主要应用领域与具体用途

该化合物广泛应用于医药研发和材料科学领域。在药物化学中, 它是合成含氟药物候选分子的重要中间体, 尤其用于抗肿瘤、抗炎和中枢神经系统药物的开发。在材料科学中, 其独特的氟化结构可用于制备高性能聚合物或液晶材料。此外, 它还可用作有机合成中的氟化试剂或保护基团。

### 4. 储存条件与使用建议

建议将本品密封保存于干燥、避光的条件下, 储存温度应控制在  $2-8^{\circ}C$  以保持稳定性。开封后需充入惰性气体 (如氮气) 以防止氧化或吸湿。使用时应在通风良好的环境中操作, 避免直接接触皮肤或眼睛。建议佩戴防护手套、护目镜和实验服, 并在化学通风橱中进行称量和溶解。

### 5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测确保纯度  $\geq 96\%$ , 并严格监控杂质含量。安全数据表明, 该化合物可能对眼睛、皮肤和呼吸系统造成刺激, 操作时应避免吸入粉尘或接触。如不

慎接触，应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地法规，建议通过专业化学废物处理机构处置。详细安全信息请参考产品提供的材料安全数据表（MSDS）。