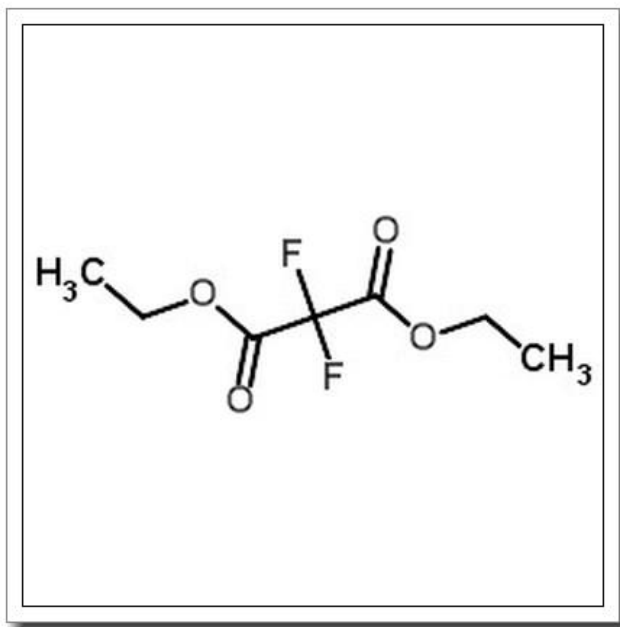


二氟丙二酸二乙酯

Diethyl difluoromalonate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Diethyl difluoromalonate
中文名称	二氟丙二酸二乙酯
CAS 号	680-65-9
分子式	C ₇ H ₁₀ F ₂ O ₄
分子量	196.149
纯度	>96%

产品说明

二氟丙二酸二乙酯 (Diethyl difluoromalonate) 产品说明书

1. 产品概述与化学特性

二氟丙二酸二乙酯是一种有机氟化合物，化学式为 $C_7H_{10}F_2O_4$ ，分子量为 196.149，CAS 号为 680-65-9。本品为无色至淡黄色液体，纯度高于 96%，具有典型的酯类气味。其结构中的两个氟原子赋予分子独特的电子效应和反应活性，使其在有机合成中表现出高选择性。该化合物易溶于常见有机溶剂如乙醇、乙醚和丙酮，但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

作为氟化丙二酸酯衍生物，二氟丙二酸二乙酯是构建含氟有机分子的关键中间体。氟原子的引入可显著改变化合物的生物活性、代谢稳定性和脂溶性，因此在药物化学和农药研发中具有重要价值。其分子中的活性亚甲基和酯基可参与多种缩合、取代和环化反应，是合成含氟杂环化合物及手性药物的高效砌块。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品广泛应用于医药、农药和材料科学领域。在医药研发中，用于合成含氟抗肿瘤药物和中枢神经系统药物；在农药领域，可作为新型含氟杀虫剂和除草剂的中间体；在材料科学中，用于制备含氟高分子单体。具体反应包括但不限于：Knoevenagel 缩合、Michael 加成及 Dieckmann 环化等。

4. 储存条件与使用建议

建议在 2-8°C 的惰性气体（如氮气）保护下避光保存，开封后需严格密封以防吸潮。使用时应于通风橱中操作，避免直接接触皮肤或吸入蒸气。反应体系中需注意水分控制，建议在水溶剂如 THF 或 DMF 中使用。长期储存需定期检测纯度，若出现颜色加深或沉淀应重新纯化。

5. 质量控制与安全信息

本品通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，GC-MS 确认无重大杂质。安全数据表明，该化合物对眼睛和呼吸道有刺激性，操作时需佩戴护目镜、防毒面具及丁腈手套。若不慎接

触，应立即用大量清水冲洗并就医。运输分类为 UN 3272，需符合III类危险化学品规范。废弃物处理应遵循当地环保法规，禁止直接排入下水道。

(全文共计 498 字)