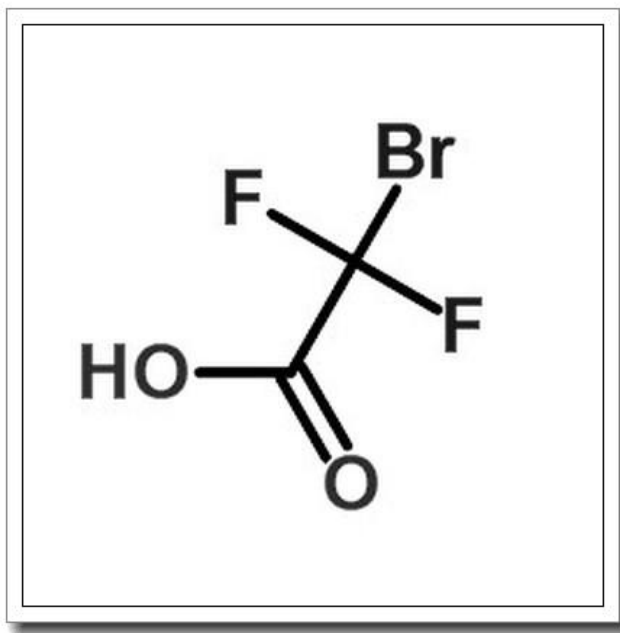


二氟溴乙酸

2-bromo-2,2-difluoroacetic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-bromo-2,2-difluoroacetic acid
中文名称	二氟溴乙酸
CAS 号	354-08-5
分子式	C ₂ HBrF ₂ O ₂
分子量	174.929
纯度	>96%

产品说明

2-溴-2,2-二氟乙酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

2-溴-2,2-二氟乙酸 (2-bromo-2,2-difluoroacetic acid) 是一种含卤有机酸，化学式为 $C_2HBrF_2O_2$ ，分子量 174.929。其 CAS 号为 354-08-5，常温下为无色至淡黄色液体，纯度通常高于 96%。该化合物同时具备溴原子和氟原子的强电负性特征，使其具有较高的反应活性，尤其在亲核取代和缩合反应中表现突出。其酸性较强 (pK_a 约 1.5)，易溶于极性有机溶剂如甲醇、乙腈，微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为二氟甲基化试剂的前体，2-溴-2,2-二氟乙酸在修饰生物分子结构方面具有独特价值。氟原子的引入可显著改变化合物的脂溶性、代谢稳定性和生物膜穿透性，因此在药物设计中常用于优化先导化合物的药代动力学性质。此外，其溴原子可作为活性位点参与偶联反应，在合成含氟氨基酸或核苷酸类似物中发挥关键作用。

3. 主要应用领域与具体用途

该试剂广泛应用于医药研发、农用化学品合成及材料科学领域。在医药化学中，用于构建含二氟甲基的靶向药物分子（如抗肿瘤剂、酶抑制剂）；在农药领域，可作为合成高效含氟杀虫剂的中间体；在材料科学中，用于制备含氟高分子单体。典型反应包括与硫醇类化合物生成二氟硫醚、与醇类缩合为二氟乙酸酯等。

4. 储存条件与使用建议

需密封保存于阴凉干燥处，推荐温度范围为 2-8°C，避免光照及潮湿环境。开封后建议充惰性气体保护以延长稳定性。操作时应在通风橱中进行，佩戴耐酸碱手套、护目镜及防护服。因其具有腐蚀性，避免与皮肤、黏膜直接接触。溶解性测试表明，使用前宜以无水二甲基亚砜 (DMSO) 或四氢呋喃 (THF) 配制为储备液。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，水分含量 $\leq 0.5\%$ ，残留溶剂符合 ICH 标准。安全数据表明，其属于腐蚀性物质 (GHS 分类第 8 类)，UN 编号 3261。如发生泄漏，

需用惰性吸附材料处理并中和。急救措施包括：皮肤接触后立即用大量清水冲洗 15 分钟，眼睛接触时用生理盐水持续冲洗并就医。废弃物处置应遵守当地危险化学品管理条例。

注：具体实验方案需结合目标反应体系优化，建议参考文献或进行小试验证。