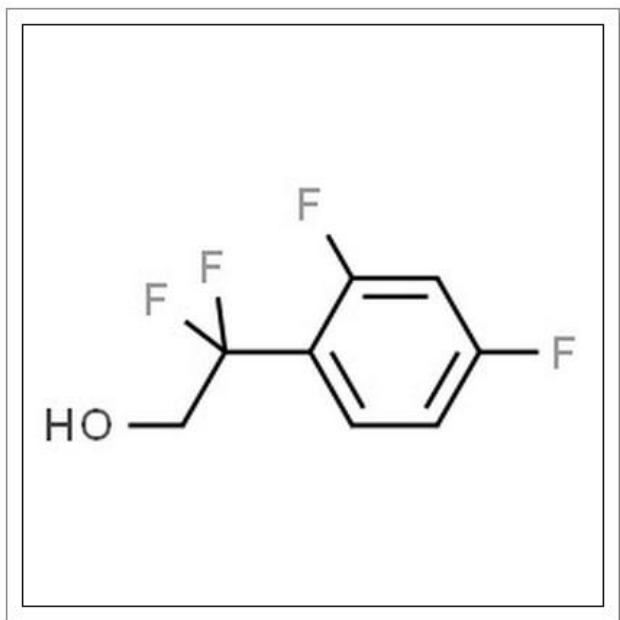


2-(2,4-二氟苯基)-2,2-二氟乙烷-1-醇

2-(2,4-difluorophenyl)-2,2-difluoroethan-1-ol



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-(2,4-difluorophenyl)-2,2-difluoroethan-1-ol
中文名称	2-(2,4-二氟苯基)-2,2-二氟乙烷-1-醇
CAS 号	1581274-08-9
分子式	C ₈ H ₆ F ₄ O
分子量	194.126
纯度	>96%

产品说明

2-(2,4-二氟苯基)-2,2-二氟乙烷-1-醇产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本品为含氟芳香族化合物，化学名称为 2-(2,4-difluorophenyl)-2,2-difluoroethan-1-ol，CAS 号 1581274-08-9，分子式 C₈H₆F₄O，分子量 194.126。外观为无色至淡黄色透明液体，纯度 ≥96% (HPLC)。其结构中的二氟苯基与二氟乙醇基团赋予分子高电负性和脂溶性，25℃时密度约 1.45 g/cm³，需避光保存。

2. 生物化学功能与重要性

作为含氟生物电子等排体，该化合物可通过氟原子模拟羟基或氢键供体，显著改变母体分子的代谢稳定性和膜穿透性。其特殊结构在药物设计中常用于：

- 调节小分子药物的 pKa 值
- 增强与靶蛋白疏水口袋的结合力
- 降低氧化代谢速率以延长半衰期

3. 主要应用领域与具体用途

- 3.1 医药研发：用作抗真菌药和抗肿瘤化合物的关键中间体，尤其适用于三唑类药物的结构修饰
- 3.2 材料科学：合成含氟液晶材料的单体组分
- 3.3 农药化学：开发新型含氟杀虫剂的增效剂
- 3.4 科研领域：作为 ¹⁹F-NMR 探针的标记前体

4. 储存条件与使用建议

储存于惰性气体（如氩气）保护的密封容器中，温度 -20℃ 至 4℃，有效期 24 个月。使用时需在干燥环境下操作，建议佩戴丁腈手套和护目镜。溶解性测试表明易溶于 DMF、DMSO 等极性非质子溶剂 (>50 mg/mL)，水溶性 <0.1 mg/mL。

5. 质量控制与安全信息

批次纯度通过 HPLC (C18 柱，乙腈/水梯度洗脱) 和 GC-MS 双重验证，残留溶剂符

合 ICH Q3C 标准。安全数据：急性毒性（LD50 大鼠口服）>500 mg/kg，皮肤刺激性类别 3。废弃物处理需遵循当地法规，建议采用高温焚烧法。

（注：本说明基于现有研究数据，实际应用前请务必查阅最新文献并开展小试实验）