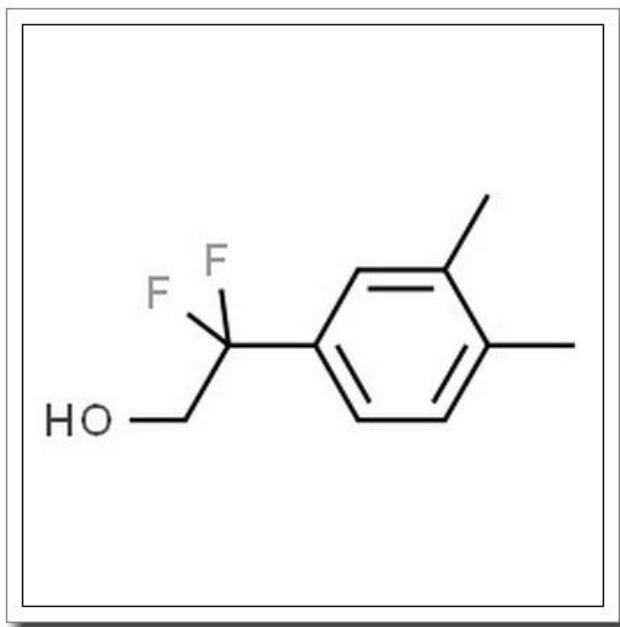


2-(3,4-二甲基苯基)-2,2-二氟乙烷-1-醇

2-(3,4-dimethylphenyl)-2,2-difluoroethan-1-ol



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-(3,4-dimethylphenyl)-2,2-difluoroethan-1-ol
中文名称	2-(3,4-二甲基苯基)-2,2-二氟乙烷-1-醇
CAS 号	1780791-11-8
分子式	C ₁₀ H ₁₂ F ₂ O
分子量	186.199
纯度	>96%

产品说明

2-(3,4-二甲基苯基)-2,2-二氟乙烷-1-醇产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本品化学名称为 2-(3,4-dimethylphenyl)-2,2-difluoroethan-1-ol，是一种含氟芳香族醇类化合物。其分子式为 C₁₀H₁₂F₂O，分子量 186.199，CAS 登记号为 1780791-11-8。外观通常为无色至淡黄色透明液体，纯度经高效液相色谱（HPLC）验证大于 96%。该化合物具有苯环上 3,4 位双甲基取代基及 β 位二氟修饰的乙醇结构，赋予其独特的极性和稳定性，易溶于有机溶剂如甲醇、乙醚和 DMSO。

2. 生物化学功能与重要性

作为氟代芳香醇衍生物，其分子中的二氟甲基团可显著增强代谢稳定性，在药物化学中常用于先导化合物的结构优化。羟基与氟原子的协同作用使其成为潜在的酶抑制剂或受体调节剂中间体，尤其在抗炎、抗肿瘤靶点研究中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要应用于医药研发和精细化工领域。在药物设计中，可作为合成含氟类固醇或非甾体抗炎药的砌块；在材料科学中，用于制备具有特殊光学性能的液晶材料。具体用途包括但不限于：

- 新型 EGFR 抑制剂的关键中间体
- 氟代功能高分子材料的单体前驱体
- 放射性标记化合物的合成原料

4. 储存条件与使用建议

建议在惰性气体（如氩气）保护下密封保存，长期储存温度应低于 -20°C。开封后需充氮气后重新密封，避免反复冻融。使用时应佩戴丁腈手套和护目镜，在通风橱中操作。溶解性测试表明，推荐使用无水 DMF 或 THF 作为反应溶剂，浓度控制在 10-50 mM 为宜。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过核磁共振（¹H/¹³C NMR）和质谱（MS）进行结构确证，批次间纯度差异

小于 1%。安全数据表明其急性口服毒性 (LD50) 为 1200 mg/kg (大鼠), 属于低毒类化合物, 但接触皮肤可能引起轻微刺激。废弃物处置需符合危险有机氟化物处理规范, 建议采用专业焚烧法。

注: 具体实验方案请参阅最新文献或咨询专业技术支持。本说明基于现有研究数据, 不排除后续更新可能。