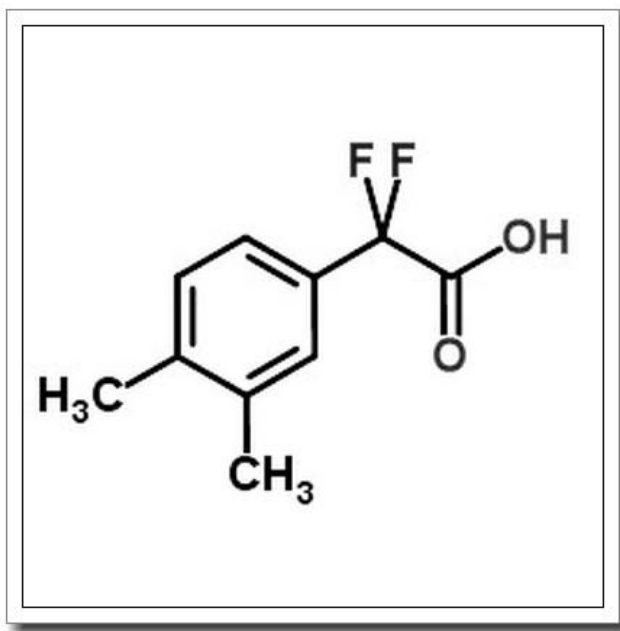


(3,4-Dimethylphenyl)(difluoro)acetic acid

(3, 4-Dimethylphenyl) (difluoro)acetic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	(3, 4-Dimethylphenyl) (difluoro)acetic acid
中文名称	(3, 4-Dimethylphenyl) (difluoro)acetic acid
CAS 号	1027514-15-3
分子式	C ₁₀ H ₁₀ F ₂ O ₂
分子量	200. 182
纯度	>96%

产品说明

(3,4-二甲基苯基) (二氟) 乙酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

(3,4-Dimethylphenyl) (difluoro)acetic acid 是一种有机氟化合物，化学式为 $C_{10}H_{10}F_2O_2$ ，分子量 200.182，CAS 号为 1027514-15-3。其结构由苯环（3,4 位甲基取代）与二氟乙酸基团组成，呈现白色至类白色结晶粉末，纯度 $\geq 96\%$ 。该化合物具有显著的疏水性和电子效应，二氟甲基的引入增强了其代谢稳定性和生物活性，使其成为医药及农药中间体的重要候选分子。

2. 生物化学功能与重要性

作为含氟芳香族衍生物，该分子可通过干扰酶活性或受体结合发挥调控作用。二氟乙酸基团能模拟天然羧酸代谢物，潜在应用于抑制剂设计；苯环上的甲基修饰可优化脂溶性和空间位阻，提升靶向性。在药物化学中，此类结构常用于抗炎、抗肿瘤及中枢神经系统药物的开发。

3. 主要应用领域与具体用途

医药研发：作为关键中间体，用于合成小分子靶向药物，尤其是激酶抑制剂或 GPCR 调节剂。

农药科学：衍生物可设计为除草剂或杀菌剂，利用氟原子的强电负性增强作用效率。

材料化学：用于制备含氟高分子单体，改善材料耐候性和表面性能。

4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中，避光、防潮，推荐温度 $-20^{\circ}C$ 至 $4^{\circ}C$ 。长期保存需充惰性气体保护。使用时佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩，避免吸入或皮肤接触。溶解建议采用极性有机溶剂（如 DMSO、甲醇），浓度需根据实验体系优化。

5. 质量控制与安全信息

HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，批次间偏差 $< 1\%$ 。潜在危害包括皮肤刺激性（GHS 分类

Category 2) 和眼损伤风险 (Category 1)。泄漏处理需用惰性吸附材料收集, 避免扬尘。废弃物按有害化学品规范处置。MSDS 可应要求提供。

注: 本产品仅限科研用途, 不适用于临床或食品领域。使用前请查阅最新文献并评估合规性。