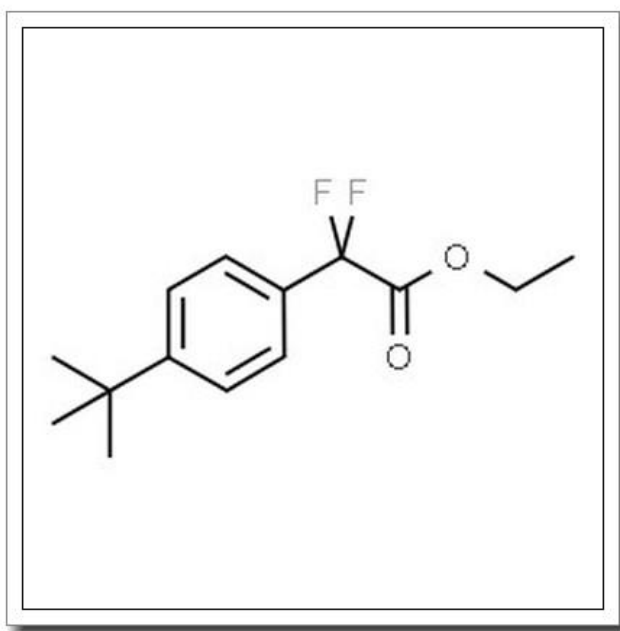


4-叔丁基-ALPHA,ALPHA-二氟苯乙酸乙酯

Ethyl-2,2-difluoro-2-(4-tert-butylphenyl)acetate



产品基本信息

| 属性 | 值 |
|-------|---|
| 化学名称 | Ethyl-2,2-difluoro-2-(4-tert-butylphenyl)acetate |
| 中文名称 | 4-叔丁基-ALPHA, ALPHA-二氟苯乙酸乙酯 |
| CAS 号 | 1027514-13-1 |
| 分子式 | C ₁₄ H ₁₈ F ₂ O ₂ |
| 分子量 | 256.29 |
| 纯度 | >96% |

产品说明

4-叔丁基-ALPHA, ALPHA-二氟苯乙酸乙酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 Ethyl-2,2-difluoro-2-(4-tert-butylphenyl)acetate, 是一种含氟芳香族乙酸酯衍生物。其分子式为 C₁₄H₁₈F₂O₂, 分子量 256.29, CAS 登记号 1027514-13-1。外观通常为无色至淡黄色透明液体, 纯度 ≥96%。该化合物结构中的叔丁基和双氟取代基赋予其独特的空间位阻效应和电子特性, 使其在有机合成中表现出高反应选择性。

2. 生物化学功能与重要性

作为 α, α -二氟乙酸酯类化合物, 其分子中的碳-氟键具有强极性和代谢稳定性, 在药物化学中常用于模拟羧酸或醇的过渡态结构。二氟甲基的引入能显著改变分子的脂溶性、生物利用度及与靶标蛋白的相互作用能力, 是设计酶抑制剂和受体调节剂的关键药效团。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要应用于以下领域:

- 3.1 医药中间体: 用于合成含氟甾体抗炎药、抗肿瘤化合物及中枢神经系统药物。
- 3.2 农药化学: 作为高效杀虫剂和除草剂的活性片段, 如拟除虫菊酯类化合物的修饰前体。
- 3.3 材料科学: 参与制备含氟液晶材料或特种聚合物单体。
- 3.4 科研用途: 在不对称催化、C-F 键活化等机理研究中作为标准底物。

4. 储存条件与使用建议

储存于惰性气体 (如氩气) 保护的密闭容器中, 避光保存于 -20°C 至 4°C 环境。开封后建议分装使用, 避免反复冻融。操作时需在通风橱中进行, 佩戴防化手套和护目镜。溶解性测试表明其易溶于乙醚、二氯甲烷等有机溶剂, 水溶性极低, 反应体系中需严格控制水分含量。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，GC-MS 确认无重金属残留。安全数据表明其急性毒性（LD50）为大鼠经口 >2000 mg/kg，但长期接触可能对肝脏造成损伤。如发生泄漏，需用吸附材料处理并按照危险化学品废弃物处置。运输分类为 UN 1993/PG III，需避免与强氧化剂共存。

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，产品应用可能涉及专利限制，请确保使用符合相关法规。