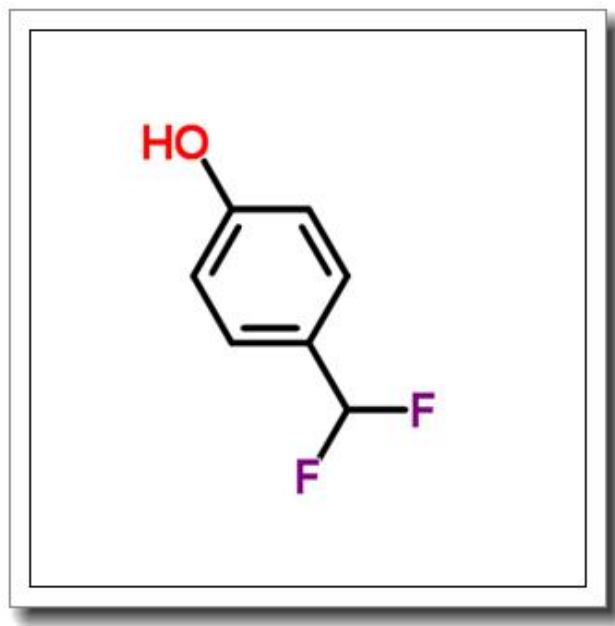


4-二氟甲基苯酚

4-(Difluoromethyl)phenol



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-(Difluoromethyl)phenol
中文名称	4-二氟甲基苯酚
CAS 号	403648-76-0
分子式	C ₇ H ₆ F ₂ O
分子量	144.119
纯度	≥ 96%

产品说明

4-(二氟甲基)苯酚产品说明书

1. 产品概述与化学特性

4-(二氟甲基)苯酚 (化学名称: 4-(Difluoromethyl)phenol, CAS 号: 403648-76-0) 是一种含氟芳香族化合物, 分子式为 $C_7H_6F_2O$, 分子量 144.119。本品为白色至类白色结晶或粉末, 纯度 $\geq 96\%$, 具有苯酚衍生物的典型化学性质, 同时因二氟甲基的引入而表现出独特的电子效应和疏水性。其结构中酚羟基与二氟甲基的协同作用, 使其在有机合成和药物化学中具有重要价值。

2. 生物化学功能与重要性

作为氟代酚类化合物, 4-(二氟甲基)苯酚可通过氢键供体和疏水相互作用参与分子识别, 常用于构建酶抑制剂或受体配体的核心结构。二氟甲基的强电负性可调节化合物的 pK_a 值, 增强其细胞膜穿透能力, 在药物设计中用于优化代谢稳定性和生物利用度。

3. 主要应用领域与具体用途

本品广泛应用于医药中间体、农药活性分子及功能材料的合成。在药物研发中, 常用于抗肿瘤、抗感染化合物的结构修饰; 在农用化学品领域, 可作为杀菌剂或除草剂的关键前体。此外, 其衍生物还可用于液晶材料或高分子聚合物的功能性单体。

4. 储存条件与使用建议

需密封保存于干燥、避光环境中, 推荐温度 $2-8^{\circ}C$ 。开封后建议充惰性气体保护, 避免吸湿和氧化。使用时应在通风橱中操作, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明, 本品易溶于甲醇、乙腈等有机溶剂, 水溶性较低, 建议预先配制储备液。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC 和 NMR 严格检测纯度及杂质谱, 批号关联完整分析证书。本品对眼睛和呼吸道有刺激性, 操作时需佩戴防护眼镜、手套及防尘口罩。若不慎接触, 立即用

大量清水冲洗并就医。废弃物处置需符合危险化学品管理规范，禁止直接排入环境。

（注：本说明基于现有研究数据编制，具体应用需结合实验方案进一步验证。）