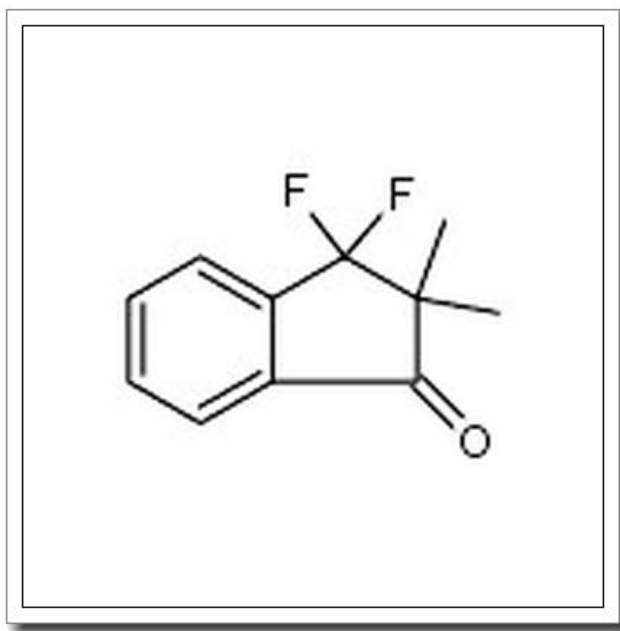


2,2-二甲基-3,3-二氟-1-茛满酮

1H- Inden- 1- one, 3, 3- difluoro- 2, 3- dihydro- 2, 2- dimethyl



产品基本信息

属性	值
化学名称	1H- Inden- 1- one, 3, 3- difluoro- 2, 3- dihydro- 2, 2- dimethyl
中文名称	2,2-二甲基-3,3-二氟-1-茛满酮
CAS 号	1034921-55-5
分子式	C ₁₁ H ₁₀ F ₂ O
分子量	196.193
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为 2,2-二甲基-3,3-二氟-1-茛满酮（化学名称：3,3-difluoro-2,3-dihydro-2,2-dimethyl-1H-inden-1-one），CAS 号 1034921-55-5，分子式 C₁₁H₁₀F₂O，分子量 196.193，是一种高纯度（>96%）的含氟茛满酮衍生物。其结构特征为茛满酮骨架的 2 位和 3 位分别引入二甲基和二氟取代基，赋予其独特的电子效应和空间位阻，显著影响其化学反应性与生物活性。该化合物常温下为白色至类白色结晶或粉末，需避光保存，易溶于有机溶剂如 DMSO、甲醇等，微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为含氟有机小分子，本品在药物化学和材料科学中具有重要价值。氟原子的引入可增强化合物的代谢稳定性、脂溶性和靶标结合能力，常用于先导化合物结构优化。其茛满酮核心结构是多种生物活性分子的药效团，例如抗炎、抗肿瘤及神经保护剂的开发中常见类似骨架。二氟甲基的强吸电子特性可调节分子内电荷分布，影响与酶或受体的相互作用。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要应用于医药研发领域，作为关键中间体用于合成含氟药物分子，尤其在激酶抑制剂、GPCR 调节剂的设计中具有潜力。在材料科学中，可用于制备含氟液晶或光电材料，改善材料的热稳定性和介电性能。此外，在农用化学品研发中，可作为结构模块用于新型杀虫剂或除草剂的开发。

4. 储存条件与使用建议

建议密封储存于 -20° C 至 4° C 的干燥环境中，避免光照与潮湿。开封后需充惰性气体保护以防降解。使用时应在通风橱中操作，佩戴防护手套和护目镜。溶解推荐使用高纯度 DMSO，配制溶液需现配现用，长期储存可能导致分解。运输时需符合化学品安全规定，避免与强氧化剂接触。

5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC 检测纯度 ≥96%，残留溶剂符合 ICH 标准。MS 和 NMR 谱图确保结构确

证。安全数据表明，该化合物可能对眼睛和皮肤有刺激性，操作时需遵循 GHS 分类：H315（造成皮肤刺激）、H319（造成严重眼刺激）。若不慎接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地环保法规，不可直接排入下水道。

注：以上信息基于现有研究数据，具体应用需进一步实验验证。建议用户在使用前查阅最新版安全技术说明书（MSDS）并开展风险评估。