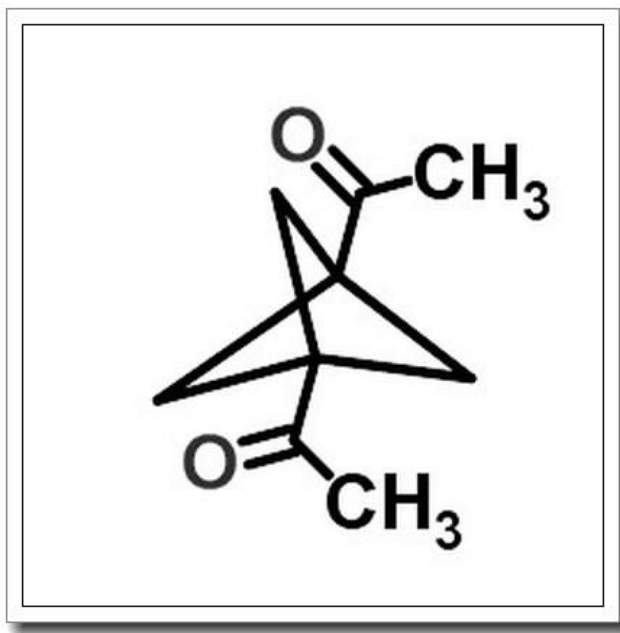


乙酮,1,1-二环[1.1.1]戊烷-1,3-二基双

1,1'-(bicyclo[1.1.1]pentane-1,3-diyl)diethanone



产品基本信息

属性	值
化学名称	1,1'-(bicyclo[1.1.1]pentane-1,3-diyl)diethanone
中文名称	乙酮,1,1-二环[1.1.1]戊烷-1,3-二基双
CAS 号	115913-30-9
分子式	C ₉ H ₁₂ O ₂
分子量	152.19
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

乙酮, 1,1-二环[1.1.1]戊烷-1,3-二基双 (化学名称: 1,1'-
(bicyclo[1.1.1]pentane-1,3-diyl)diethanone) 是一种具有独特结构的有机化合物, CAS 号为 115913-30-9, 分子式为 C₉H₁₂O₂, 分子量为 152.19。该化合物以二环[1.1.1]戊烷为核心骨架, 两端连接乙酮基团, 形成高度对称的分子结构。其纯度通常高于 96%, 外观为白色至类白色结晶或粉末, 具有良好的化学稳定性和溶解性, 可溶于多种有机溶剂如乙醇、丙酮和二甲基亚砷 (DMSO)。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物因其特殊的二环[1.1.1]戊烷结构, 在药物化学和材料科学中具有重要价值。二环[1.1.1]戊烷是一种刚性且空间位阻较大的基团, 常用于药物设计中作为苯环或脂肪环的生物电子等排体, 以改善药物的代谢稳定性、溶解性或靶标结合能力。此外, 其双乙酮结构可作为合成中间体, 进一步衍生化为其他功能分子。

3. 主要应用领域与具体用途

乙酮, 1,1-二环[1.1.1]戊烷-1,3-二基双主要用于以下领域:

- 药物研发: 作为关键中间体用于合成具有生物活性的小分子药物, 尤其在抗肿瘤、抗炎和中枢神经系统药物开发中具有潜力。
- 材料科学: 用于合成高性能聚合物或功能材料, 改善材料的机械性能或热稳定性。
- 化学研究: 作为探针分子或模板化合物, 用于研究刚性骨架对分子性质的影响。

4. 储存条件与使用建议

该产品需在干燥、避光的环境中储存, 建议温度范围为 2-8° C, 长期保存可置于惰性气体 (如氮气) 保护下。使用时应避免直接接触皮肤和眼睛, 操作时佩戴防护手套、护目镜和实验服。溶解或稀释时需选择合适的有机溶剂, 并确保通风良好。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过高效液相色谱 (HPLC) 或气相色谱 (GC) 检测, 纯度均一性严格控制在

96%以上。安全信息如下:

- 可能对眼睛、皮肤和呼吸道有刺激性，使用后需彻底清洗接触部位。
- 远离火源和强氧化剂，避免高温或明火环境。
- 如发生泄漏，需用惰性吸附材料处理，并按照当地法规处置废弃物。
- 具体安全操作请参考产品安全数据表（SDS）。