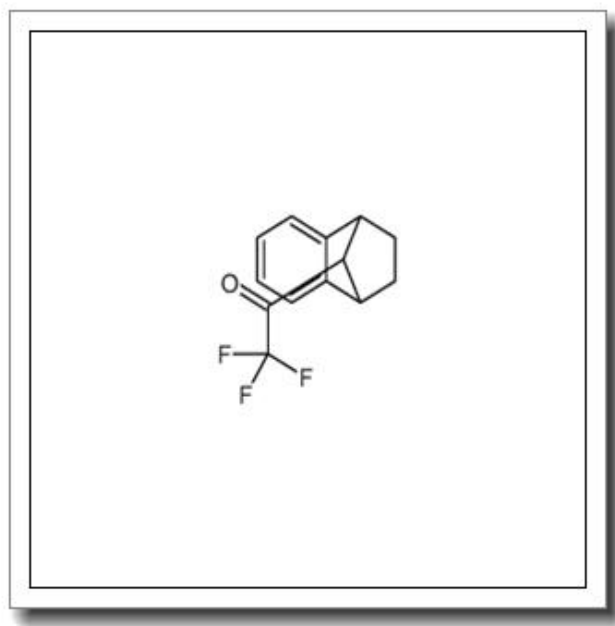


2,2,2-Trifluoro-1-(tricyclo[6.2.1.0^{2,7}]undeca-2,4,6-trien-11-yl)ethanone

2,2,2-Trifluoro-1-(tricyclo[6.2.1.0^{2,7}]undeca-2,4,6-trien-11-yl)ethanone



产品基本信息

属性	值
化学名称	2,2,2-Trifluoro-1-(tricyclo[6.2.1.0 ^{2,7}]undeca-2,4,6-trien-11-yl)ethanone
中文名称	2,2,2-Trifluoro-1-(tricyclo[6.2.1.0 ^{2,7}]undeca-2,4,6-trien-11-yl)ethanone
CAS 号	942491-77-2
分子式	C ₁₃ H ₁₁ F ₃ O
分子量	240.221
纯度	≥96%

产品说明

2, 2, 2-三氟-1-(三环[6. 2. 1. 02, 7]十一碳-2, 4, 6-三烯-11-基) 乙酮产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为高纯度有机氟化合物，化学名称为 2, 2, 2-Trifluoro-1-(tricyclo[6. 2. 1. 02, 7]undeca-2, 4, 6-trien-11-yl) ethanone, CAS 号 942491-77-2, 分子式 C₁₃H₁₁F₃O, 分子量 240. 221。其结构特征为三环骨架与三氟乙酰基的结合，赋予其独特的空间位阻效应和电子特性。常温下呈白色至类白色结晶粉末，纯度 ≥96% (HPLC)，易溶于有机溶剂如二氯甲烷、THF，微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物因其三氟甲基的强吸电子性和刚性三环结构，在药物化学中作为关键中间体，可显著调节母体分子的脂溶性、代谢稳定性和生物活性。其结构中的烯酮片段能与亲核试剂发生迈克尔加成反应，是构建含氟杂环化合物的重要前体。在酶抑制研究中，三氟乙酰基可模拟天然底物的过渡态结构，适用于蛋白酶抑制剂的开发。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发和材料科学领域。在药物设计中，用于合成抗肿瘤、抗病毒（如 HCV 蛋白酶抑制剂）及中枢神经系统药物的含氟衍生物。在材料领域，可作为液晶材料的刚性核心单元或光敏树脂的交联剂。实验室级用途包括有机氟化学机理研究、不对称催化反应底物开发等。

4. 储存条件与使用建议

储存于-20℃、惰性气体保护的密闭容器中，避免光照和湿度。开封后建议分装使用，剩余物料需充氩气保存。操作时需在通风橱中进行，佩戴防化手套和护目镜。溶解性测试显示，推荐使用无水 DMF 或甲苯作为反应溶剂，浓度控制在 0. 1-0. 5M 以避免副反应。

5. 质量控制与安全信息

批次纯度通过 HPLC (C18 柱, 乙腈/水梯度洗脱) 和 19F NMR 双重验证, 残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。安全数据表明, 该化合物对呼吸道和皮肤有刺激性 (GHS 分

类：H315-H319-H335），操作后需彻底清洗暴露部位。废弃物处置应遵循含氟有机物处理规范，禁止直接排入下水系统。

（注：本说明基于现有研究数据编制，实际应用前请查阅最新文献并开展小试验证。）