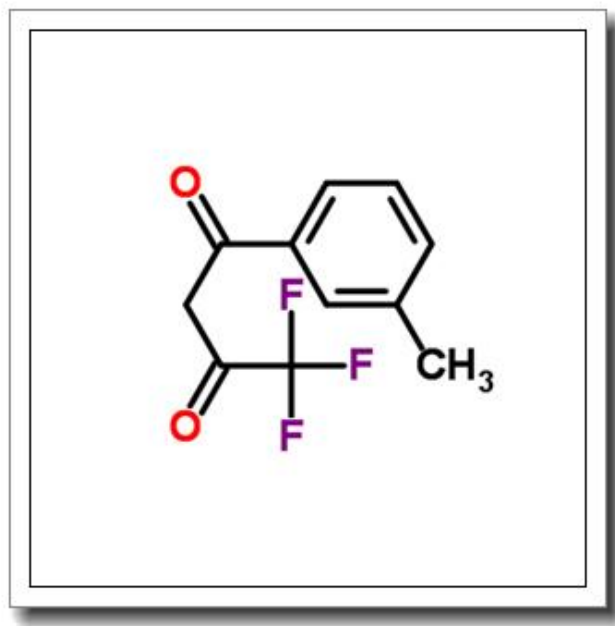


4,4,4-三氟-1-(间甲苯)丁烷-1,3-二酮

4,4,4-trifluoro-1-(3-methylphenyl)butane-1,3-dione



产品基本信息

属性	值
化学名称	4,4,4-trifluoro-1-(3-methylphenyl)butane-1,3-dione
中文名称	4,4,4-三氟-1-(间甲苯)丁烷-1,3-二酮
CAS 号	53764-99-1
分子式	C ₁₁ H ₉ F ₃ O ₂
分子量	230.183
纯度	≥96%

产品说明

4, 4, 4-三氟-1-(间甲苯)丁烷-1, 3-二酮产品说明书

1. 产品概述与化学特性

4, 4, 4-三氟-1-(间甲苯)丁烷-1, 3-二酮 (CAS 号: 53764-99-1) 是一种含氟 β -二酮类化合物, 分子式为 $C_{11}H_9F_3O_2$, 分子量为 230.183。其结构中包含三氟甲基和芳香环, 赋予其独特的化学稳定性与反应活性。常温下为白色至淡黄色结晶或粉末, 纯度 $\geq 96\%$, 易溶于有机溶剂如乙醇、丙酮和乙醚, 微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为三氟甲基化试剂和金属螯合剂, 在配位化学中可与过渡金属形成稳定络合物, 广泛应用于催化剂设计和材料合成。其 β -二酮结构使其成为合成杂环化合物 (如吡唑类、嘧啶类) 的关键中间体, 在药物化学中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药领域, 用于抗炎、抗肿瘤药物的先导化合物合成; 在材料科学中, 作为有机发光二极管 (OLED) 和液晶材料的前体。此外, 在农用化学品研发中, 可用于新型杀虫剂和除草剂的分子构建。实验室中常用于过渡金属催化反应和氟化学研究。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 $2-8^{\circ}C$ 干燥避光环境中, 避免与强氧化剂接触。开封后需充惰性气体保护以延长稳定性。使用时应在通风橱中操作, 佩戴防护手套和护目镜。溶解性测试推荐使用无水级溶剂以减少水解风险。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和 NMR 严格检测, 确保纯度 $\geq 96\%$ 。MSDS 数据显示其具有刺激性, 接触皮肤或眼睛需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应作为有害化学废料处理, 遵守当地环保法规。运输分类为 UN 3077, 需贴注环境危害标识。

注: 具体实验方案请参阅最新文献, 批量采购可提供定制化纯度方案和技术支持。