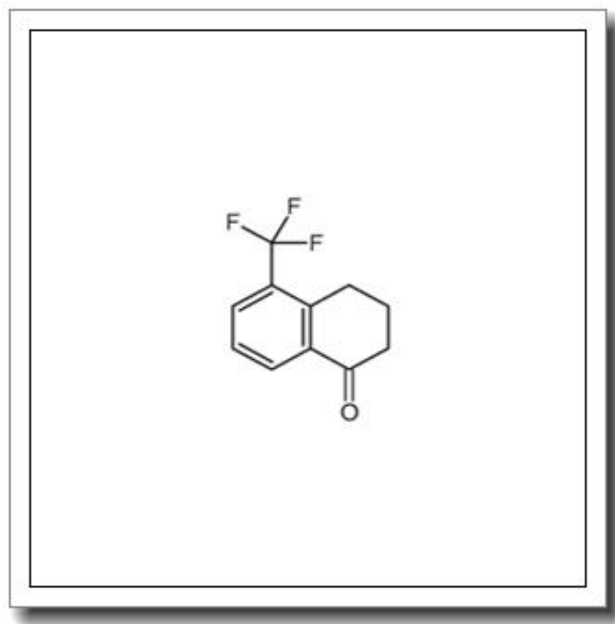


# 5-三氟甲基-1-四酮

*5-(trifluoromethyl)-3,4-dihydro-2H-naphthalen-1-one*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	5-(trifluoromethyl)-3,4-dihydro-2H-naphthalen-1-one
中文名称	5-三氟甲基-1-四酮
CAS 号	885268-02-0
分子式	C <sub>11</sub> H <sub>9</sub> F <sub>3</sub> O
分子量	214.184
纯度	≥96%

## 产品说明

### 5-(三氟甲基)-3,4-二氢-2H-萘-1-酮产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

本品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 5-(trifluoromethyl)-3,4-dihydro-2H-naphthalen-1-one，中文别名 5-三氟甲基-1-四酮，CAS 登记号 885268-02-0。其分子式为 C<sub>11</sub>H<sub>9</sub>F<sub>3</sub>O，分子量 214.184，纯度 ≥96%。该化合物具有萘环骨架结构，1 位羰基与 3,4 位饱和碳键形成二氢萘酮特征母核，5 位三氟甲基的强吸电子效应显著影响其化学反应活性。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为含氟芳香族酮类化合物，其结构中的三氟甲基可增强代谢稳定性及脂溶性，在药物化学中常用于先导化合物修饰。羰基官能团可作为氢键受体参与分子识别，而芳香环系统则提供疏水相互作用位点。这些特性使其在酶抑制剂设计和受体配体开发中具有重要价值。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本品主要应用于医药中间体合成，特别用于构建含三氟甲基的活性药物成分 (API)，如抗炎、抗肿瘤靶向分子。在材料科学领域，可用作液晶材料的改性单体或有机光电材料的合成前体。实验室研究中常用于氟代芳香族化合物的反应机理探索及结构-活性关系 (SAR) 研究。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 -20°C 至 4°C 干燥环境中，避免光照及湿度超过 60%。开封后需充惰性气体保护。使用时应佩戴防护手套、护目镜，在通风橱中操作。溶解性测试表明其易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂，水溶性低 (<0.1 mg/mL)，配制溶液时建议优先选择极性非质子溶剂。

#### 5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC (面积归一化法) 测定纯度，批次间差异 <2%。重金属含量 (以 Pb 计) ≤10 ppm，残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。安全数据表明该物质对眼睛和皮肤有刺激

性（GHS 分类 Category 2），操作后需彻底清洗接触部位。废弃物处置应遵循危险化学品处理规范，不可直接排入下水道。

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