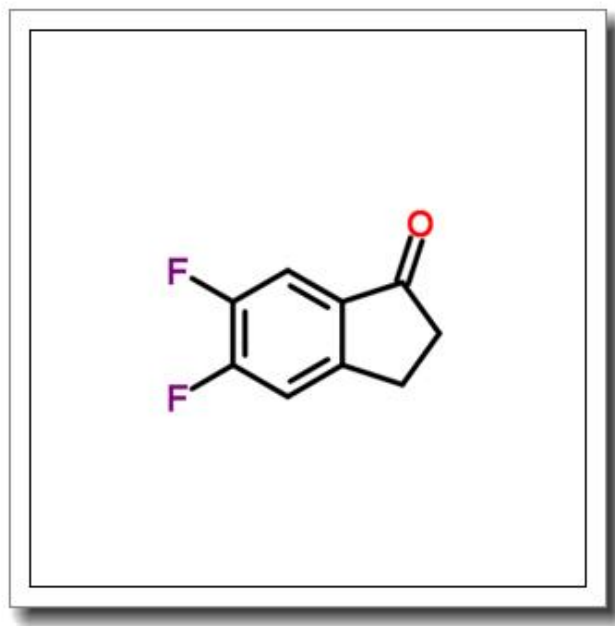


5,6-二氟-1-茛酮

5,6-difluoro-2,3-dihydroinden-1-one



产品基本信息

属性	值
化学名称	5,6-difluoro-2,3-dihydroinden-1-one
中文名称	5,6-二氟-1-茛酮
CAS 号	161712-77-2
分子式	C ₉ H ₆ F ₂ O
分子量	168.14
纯度	≥96%

产品说明

5,6-二氟-1-茛酮产品说明书

1. 产品概述与化学特性

5,6-二氟-1-茛酮 (5,6-difluoro-2,3-dihydroinden-1-one) 是一种含氟有机化合物, 化学式为 C₉H₆F₂O, 分子量为 168.14。该化合物为白色至类白色结晶或粉末, CAS 号为 161712-77-2, 纯度 ≥96%。其结构中的二氟取代基赋予其独特的电子效应和空间位阻, 使其在有机合成和药物化学中具有重要价值。该化合物易溶于常见有机溶剂 (如甲醇、乙醇、二甲基亚砜), 但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

5,6-二氟-1-茛酮是构建含氟杂环化合物的关键中间体。氟原子的引入可显著改善母体分子的脂溶性、代谢稳定性和生物膜穿透性, 因此在药物设计中常用于优化先导化合物的药代动力学性质。该结构片段常见于抗炎、抗肿瘤及中枢神经系统药物的活性分子中, 例如作为激酶抑制剂或 G 蛋白偶联受体调节剂的核心骨架。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发领域, 本品主要用于合成含氟药物中间体, 特别是针对肿瘤靶向治疗和神经退行性疾病的小分子药物开发。在材料科学中, 可作为液晶材料或光电功能材料的改性单元。此外, 在农用化学品领域, 其衍生物可用于开发高效低毒的含氟农药。实验室中常通过 Suzuki 偶联、亲核取代等反应进一步官能团化。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C 下避光密封保存, 长期储存需充入惰性气体保护。开封后应尽快使用, 避免反复冻融。使用时需在干燥惰性气氛 (如氮气手套箱) 中操作, 若需溶解推荐预先超声处理。工作浓度应根据具体实验体系优化, 建议先进行小剂量试用以确认溶解性和反应活性。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC、NMR 和质谱进行严格质量控制, 确保批次间稳定性。安全数据表明, 该化合物对眼睛和皮肤有刺激性, 操作时应佩戴防护手套、护目镜及防尘口

罩。若不慎接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物需按危险化学品规范处置，避免直接排放至环境中。

（注：本说明基于现有研究数据编制，具体应用需结合实验条件进一步验证。）