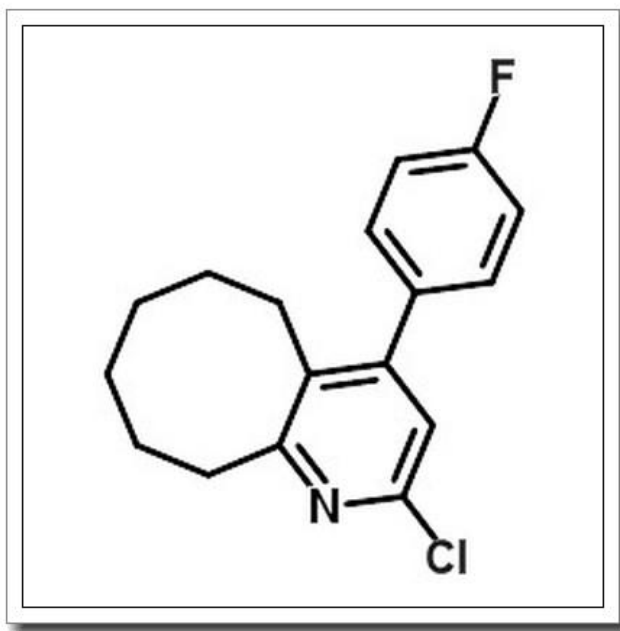


2-氯-4-(4-氟苯基)-5,6,7,8,9,10-六氢环辛烷并[b]吡啶

2-Chloro-4-(4-fluorophenyl)-5,6,7,8,9,10-hexahydrocycloocta[b]pyridine



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-Chloro-4-(4-fluorophenyl)-5,6,7,8,9,10-hexahydrocycloocta[b]pyridine
中文名称	2-氯-4-(4-氟苯基)-5,6,7,8,9,10-六氢环辛烷并[b]吡啶
CAS 号	132813-14-0
分子式	C ₁₇ H ₁₇ ClFN
分子量	289.775
纯度	>96%

产品说明

2-氯-4-(4-氟苯基)-5,6,7,8,9,10-六氢环辛烷并[b]吡啶产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称 2-Chloro-4-(4-fluorophenyl)-5,6,7,8,9,10-hexahydrocycloocta[b]pyridine，分子式 C₁₇H₁₇ClFN，分子量 289.775，CAS 登录号 132813-14-0。其结构包含氯代吡啶环与氟苯基团，具有脂溶性特征，易溶于有机溶剂如 DMSO 和甲醇，纯度经 HPLC 验证 ≥96%。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为杂环衍生物，其结构中的氯原子和氟苯基团赋予其显著的电子效应和空间位阻，可作为医药中间体参与偶联反应或杂环修饰。其环辛烷稠合体系在药物设计中常用于调节分子构象，增强靶标结合能力，尤其在神经活性分子开发中具有潜在应用价值。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于药物研发领域，特别是中枢神经系统（CNS）药物先导化合物的合成。具体用途包括：1) 作为多巴胺受体或 5-HT 受体调节剂的结构模块；2) 用于构建抗焦虑或抗抑郁药物的核心骨架；3) 在激酶抑制剂研究中作为模板分子进行结构优化。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 -20℃ 干燥环境中，避免光照及湿度波动。开封后需充惰性气体保护以延长稳定性。实验操作应在通风橱中进行，使用时应佩戴防护手套及护目镜。溶解推荐使用无水 DMSO，工作浓度需通过预实验确定。

5. 质量控制与安全信息

批次纯度经 LC-MS 和核磁共振 (1H NMR) 双重验证，残留溶剂符合 ICH 标准。该化合物对眼睛和皮肤有刺激性，安全数据表 (SDS) 编号 PS-289-1。急性毒性数据 (LD50 大鼠口服) 为 320 mg/kg，归类为 GHS06 危险品。废弃处理需遵循当地法规，建议通过专业化学品回收机构处置。

(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。)