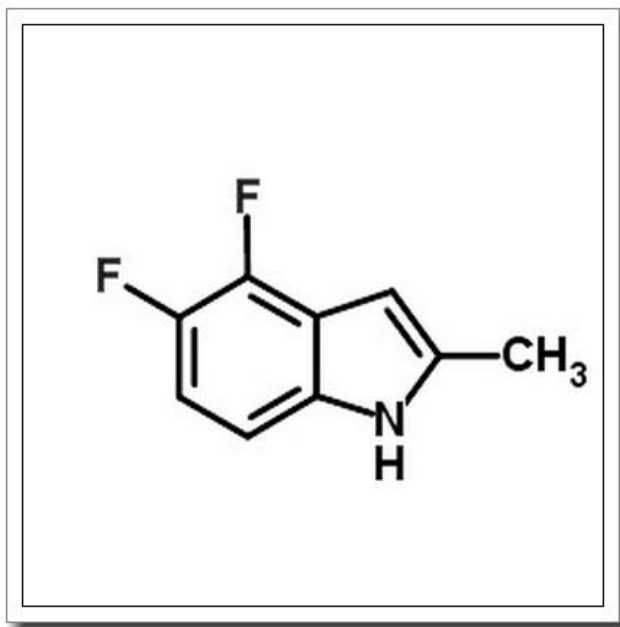


2-甲基-4,5-二氟吲哚

4,5-Difluoro-2-methylindole



产品基本信息

属性	值
化学名称	4,5-Difluoro-2-methylindole
中文名称	2-甲基-4,5-二氟吲哚
CAS 号	85462-60-8
分子式	C ₉ H ₇ F ₂ N
分子量	167.155
纯度	>96%

产品说明

4,5-二氟-2-甲基吲哚 (4,5-Difluoro-2-methylindole) 产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本品为白色至淡黄色结晶性粉末，化学名称为 4,5-二氟-2-甲基吲哚，CAS 号 85462-60-8，分子式 C₉H₇F₂N，分子量 167.155。纯度 ≥96%，可通过 HPLC 和 NMR 验证。该化合物属于氟代吲哚衍生物，结构中含两个氟原子取代基和一个甲基取代基，赋予其独特的电子效应和空间位阻特性，在有机溶剂如甲醇、乙醇、DMSO 中具有良好溶解性。

2. 生物化学功能与重要性

作为吲哚类化合物的氟化衍生物，本品是构建生物活性分子的关键中间体。氟原子的引入显著增强其脂溶性和代谢稳定性，使其在药物化学中成为优化先导化合物的重要工具。其结构特征可干扰酶活性位点或受体结合，在开发抗肿瘤、抗炎及中枢神经系统药物中具有潜在价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于医药研发和有机合成领域。具体用途包括：作为激酶抑制剂或 GPCR 配体的核心结构；用于合成含氟吲哚类荧光探针；在农药化学中用于开发新型杀虫剂。实验显示，其衍生物可作用于 5-HT 受体家族，具有神经药理研究价值。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 -20℃ 干燥避光环境中，长期储存需充惰性气体保护。开封后建议分装使用，避免反复冻融。实验操作应在通风橱中进行，佩戴防护手套和护目镜。溶解时优先选用 DMSO，配制工作液需现配现用，避免水溶液长期存放。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 GC-MS 和元素分析验证，批次间纯度差异 <1%。安全数据：急性毒性 (LD₅₀ 大鼠口服) >500 mg/kg，皮肤刺激性类别 3。废弃物处理需符合危险化学品规范，避免与强氧化剂接触。提供 MSDS 及 COA 随货文件，详细毒理学数据可另行索取。

注：本说明仅限科研用途，不适用于诊断或治疗。使用者应具备专业化学品操作资质。