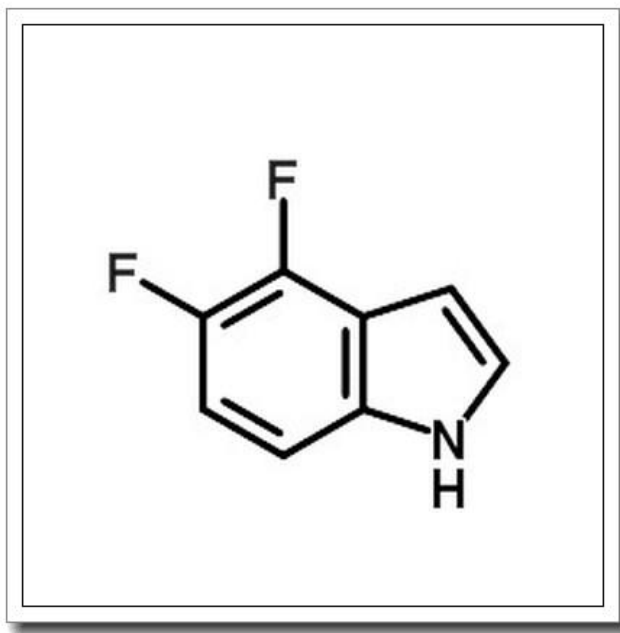


# 4,5-二氟吲哚

*4,5-difluoro-1H-indole*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	4,5-difluoro-1H-indole
中文名称	4,5-二氟吲哚
CAS 号	247564-63-2
分子式	C <sub>8</sub> H <sub>5</sub> F <sub>2</sub> N
分子量	153.129
纯度	>96%

## 产品说明

### 4, 5-二氟吲哚产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

4, 5-二氟吲哚 (4, 5-difluoro-1H-indole) 是一种含氟吲哚衍生物, 化学式为  $C_8H_5F_2N$ , 分子量 153. 129, CAS 号为 247564-63-2。本品为白色至淡黄色结晶或粉末, 纯度 >96%, 具有典型的吲哚环结构, 并在 4 位和 5 位引入氟原子, 显著增强其电子效应和生物活性。其熔点和沸点数据需根据实测结果补充, 可溶于常见有机溶剂如甲醇、乙醇和二甲基亚砜 (DMSO), 微溶于水。

#### 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, 4, 5-二氟吲哚在药物化学和材料科学中具有独特价值。氟原子的引入可调节分子脂溶性、代谢稳定性和靶标结合能力, 使其成为优化先导化合物的重要中间体。该结构在 5-羟色胺受体调节剂、抗肿瘤药物及抗菌剂研发中具有潜在应用, 其生物活性与氟原子的强电负性和空间位阻效应密切相关。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药研发和有机合成领域。在药物开发中, 可作为构建含氟杂环化合物的关键砌块, 用于合成抗抑郁、抗病毒或激酶抑制剂类候选药物。在材料科学中, 可用于制备荧光探针或光电材料前体。此外, 还可作为科研用标准品, 用于分析检测方法开发或代谢研究。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C、避光、干燥条件下密封保存, 长期储存需充入惰性气体保护。开封后应尽快使用, 避免反复冻融和暴露于潮湿环境。使用时应佩戴防护手套、护目镜, 并在通风橱中操作。溶解时建议优先选用 DMSO 或乙醇, 配制溶液需现配现用, 避免长期储存导致降解。

#### 5. 质量控制与安全信息

本品通过 HPLC 检测纯度 >96%, 批次间质量稳定。MS 和 NMR 数据可提供验证。安全

信息显示，该化合物可能对眼睛、皮肤和呼吸系统产生刺激，操作时需遵守 GHS 标准，使用个人防护装备。如接触皮肤，立即用大量清水冲洗；若吸入，移至空气新鲜处。废弃物应作为有害化学品处置，遵守当地环保法规。

（注：具体物性参数如熔点、沸点等需根据实际检测数据补充至正式文档中。）