

6,7-Difluoro-1,2,3,4-tetrahydroisoquinoline

6, 7-Difluoro-1, 2, 3, 4-tetrahydroisoquinoline



产品基本信息

属性	值
化学名称	6, 7-Difluoro-1, 2, 3, 4-tetrahydroisoquinoline
中文名称	6, 7-Difluoro-1, 2, 3, 4-tetrahydroisoquinoline
CAS 号	787640-44-2
分子式	C ₉ H ₉ F ₂ N
分子量	169. 171
纯度	>96%

产品说明

6, 7-二氟-1, 2, 3, 4-四氢异喹啉产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 6, 7-Difluoro-1, 2, 3, 4-tetrahydroisoquinoline, CAS 号为 787640-44-2, 分子式为 C₉H₉F₂N, 分子量为 169.171。该化合物是一种含氟四氢异喹啉衍生物, 纯度经高效液相色谱 (HPLC) 验证大于 96%, 外观通常为白色至类白色结晶或粉末。其结构中两个氟原子取代于苯环 6, 7 位, 赋予分子独特的电子效应和空间位阻特性, 使其在有机合成和药物化学中具有重要价值。

2. 生物化学功能与重要性

作为异喹啉类化合物的氟化衍生物, 该分子可通过参与亲核取代、偶联反应等构建复杂杂环体系。其四氢异喹啉骨架是多种生物活性分子的核心结构, 例如神经递质调节剂和抗菌剂。氟原子的引入可显著改善化合物的脂溶性、代谢稳定性及与靶标蛋白的结合能力, 因此在药物先导化合物优化中备受关注。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于医药研发和有机合成领域。在药物化学中, 常用于构建中枢神经系统药物 (如多巴胺受体调节剂) 和抗感染药物的中间体。此外, 在材料科学中可作为含氟功能材料的合成前体。具体实验用途包括但不限于: 作为配体参与不对称催化反应、用于氟代杂环库的构建、以及作为荧光探针的修饰基团。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C 惰性气体 (如氩气) 保护下避光保存, 长期储存需置于干燥器中。开封后建议分装使用以避免反复冻融。使用时应在通风橱中操作, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明该化合物易溶于二氯甲烷、DMF 等有机溶剂, 水溶性较差, 实验时需选择合适的溶剂体系。

5. 质量控制与安全信息

每批次产品均提供核磁共振 (NMR) 和质谱 (MS) 分析报告。根据安全数据表 (SDS), 该化合物可能引起眼睛和皮肤刺激, 操作时应佩戴防护眼镜和丁腈手

套。若不慎接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地危险化学品管理条例，建议通过专业机构进行无害化处理。

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。