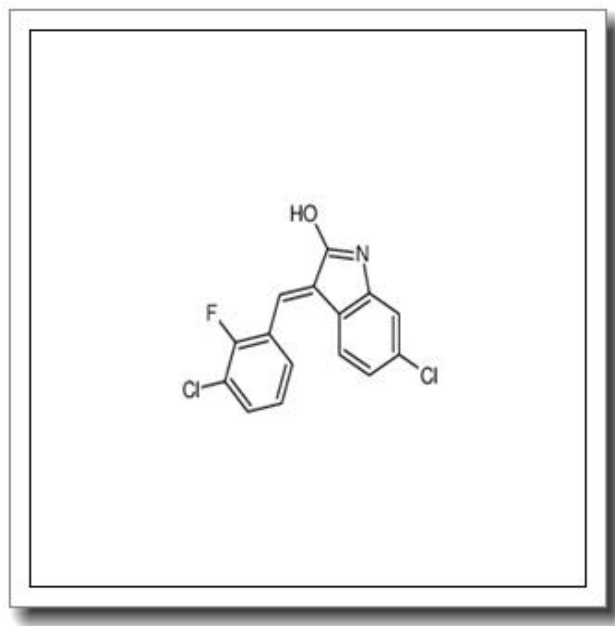


3-(3-氯-2-氟亚苄基)-6-氟吲哚-2-酮

(3Z)-6-chloro-3-[(3-chloro-2-fluorophenyl)methylidene]-1H-indol-2-one



产品基本信息

属性	值
化学名称	(3Z)-6-chloro-3-[(3-chloro-2-fluorophenyl)methylidene]-1H-indol-2-one
中文名称	3-(3-氯-2-氟亚苄基)-6-氟吲哚-2-酮
CAS 号	897365-76-3
分子式	C ₁₅ H ₈ Cl ₂ FNO
分子量	308.135
纯度	≥96%

产品说明

3-(3-氯-2-氟亚苄基)-6-氟吲哚-2-酮产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为(3Z)-6-chloro-3-[(3-chloro-2-fluorophenyl)methylidene]-1H-indol-2-one, 是一种含氟及氯取代基的吲哚酮类衍生物。其分子式为C₁₅H₈Cl₂FN₀, 分子量 308.135, CAS 号为 897365-76-3。该化合物以黄色至浅棕色结晶粉末形式存在, 纯度≥96%, 具有明确的立体构型(Z-构型)。其结构中吲哚酮环与卤代苯环的共轭体系赋予其特殊的光化学性质, 适用于药物研发及有机合成中间体领域。

2. 生物化学功能与重要性

作为小分子抑制剂的核心骨架, 该化合物可通过靶向蛋白激酶或调控细胞信号通路发挥生物活性。其分子中的卤素原子(氯、氟)能增强脂溶性与靶标结合能力, 而吲哚酮结构则提供氢键供体/受体位点。在抗肿瘤、抗炎等药物研发中具有潜在应用价值, 尤其适用于激酶抑制剂类药物的结构优化。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药研发领域, 具体包括: 1) 作为先导化合物用于激酶抑制剂的设计与合成; 2) 在荧光探针开发中作为发色团修饰基团; 3) 用于研究卤代芳烃与生物大分子的相互作用机制。实验级用途涵盖体外活性筛选、构效关系研究及分子对接实验等。

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。使用时需在干燥环境中操作, 避免接触强氧化剂。溶解性测试表明其易溶于DMSO(≥10 mg/mL), 甲醇中溶解度适中(约2-5 mg/mL), 水溶性差。建议配制溶液时现配现用, 避免反复冻融。

5. 质量控制与安全信息

本产品经HPLC检测纯度≥96%, 批次间差异<2%。安全数据表明其属于刺激性化学

品，操作时需佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩。若接触皮肤，应立即用大量清水冲洗。废弃物处置需符合危险化学品管理规范，避免直接排放至环境中。详细毒理学数据可参照随附的 MSDS 文件。

注：本说明仅限科研用途，不适用于临床或工业量产。使用者应具备专业化学知识并遵守实验室安全规程。