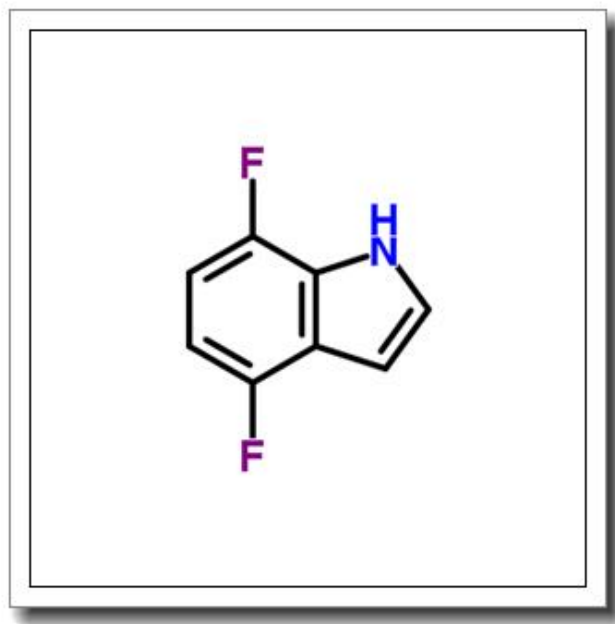


4,7-二氟吲哚

4,7-difluoro-1H-indole



产品基本信息

属性	值
化学名称	4,7-difluoro-1H-indole
中文名称	4,7-二氟吲哚
CAS 号	247564-55-2
分子式	C ₈ H ₅ F ₂ N
分子量	153.129
纯度	≥ 96%

产品说明

4, 7-二氟吲哚产品说明书

1. 产品概述与化学特性

4, 7-二氟吲哚（英文名：4, 7-difluoro-1H-indole）是一种含氟吲哚衍生物，化学式为 $C_8H_5F_2N$ ，分子量为 153.129，CAS 号为 247564-55-2。本品为白色至淡黄色结晶或粉末，纯度 $\geq 96\%$ ，具有典型的吲哚环结构，并在 4 位和 7 位引入氟原子，显著增强了其电子亲和性和生物活性。其熔点和沸点数据需根据实测结果补充，易溶于有机溶剂如甲醇、乙醇和 DMSO，微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为氟代吲哚类化合物，4, 7-二氟吲哚是药物化学和材料科学中的重要中间体。氟原子的引入可调节分子的脂溶性、代谢稳定性和靶标结合能力，使其在酶抑制、受体调节等生物过程中表现出独特活性。该结构片段常见于抗肿瘤、抗炎及中枢神经系统药物的研发中，尤其在设计激酶抑制剂和 GPCR 配体时具有较高价值。

3. 主要应用领域与具体用途

4, 7-二氟吲哚广泛应用于以下领域：

- 医药研发：用于构建先导化合物，优化药物分子的药代动力学性质。
- 农药化学：作为含氟杂环骨架，参与新型杀虫剂或杀菌剂的合成。
- 材料科学：可作为有机发光二极管（OLED）或液晶材料的功能性单体。
- 学术研究：用于氟代杂环化合物的反应机理探索及结构-活性关系研究。

4. 储存条件与使用建议

本品需避光密封保存于 $-20^{\circ}C$ 至 $4^{\circ}C$ 干燥环境中，长期储存建议充氮保护。开封后需尽快使用，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。溶解时建议使用惰性有机溶剂，并避免与强氧化剂或强酸接触。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，MS 和 NMR 验证结构一致性。安全数据表明，其急

性毒性 (LD50) 需参考具体实验数据, 操作时需防范吸入或皮肤接触。如意外接触, 立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置需符合当地化学品管理法规。

注: 本说明基于现有实验数据编制, 具体应用需结合用户实验条件进一步验证。