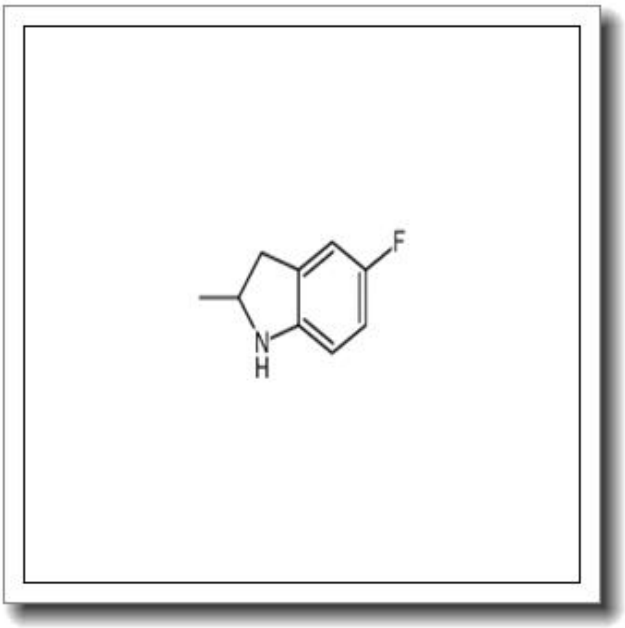
5-氟-2-甲基吲哚啉

5-fluoro-2-methyl-2,3-dihydro-1H-indole



产品基本信息

属性	值
化学名称	5-fluoro-2-methyl-2,3-dihydro-1H-indole
中文名称	5-氟-2-甲基吲哚啉
CAS 号	825-70-7
分子式	C9H10FN
分子量	151.181
纯度	≧96%

产品说明

5-氟-2-甲基吲哚啉产品说明书

1. 产品概述与化学特性

5-氟-2-甲基吲哚啉（化学名称：5-fluoro-2-methyl-2,3-dihydro-1H-indole）是一种含氟杂环化合物，分子式为 C9H10FN，分子量 151.181，CAS 号为 825-70-7。本品为白色至淡黄色结晶或粉末，纯度≥96%，具有吲哚啉母核结构，其 2 位甲基和 5 位氟取代基赋予其独特的电子效应和空间位阻特性。该化合物在有机溶剂（如甲醇、乙醇、二氯甲烷）中溶解性良好，但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

作为吲哚啉类衍生物，5-氟-2-甲基吲哚啉是构建生物活性分子的重要中间体。氟原子的引入可显著增强化合物的脂溶性和代谢稳定性，而吲哚啉骨架广泛存在于天然产物及药物分子中（如 5-羟色胺受体调节剂）。其在药物化学中常用于优化先导化合物的药理活性、选择性及药代动力学性质。

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，具体包括：

3.1 药物中间体：用于合成抗抑郁、抗肿瘤及中枢神经系统药物。

3.2 荧光探针前体：修饰后可开发用于生物成像的荧光标记物。

3.3 农药化学：作为含氟杂环结构单元参与新型杀虫剂或杀菌剂的合成。

4. 储存条件与使用建议

4.1 储存条件：密封保存于 2-8℃干燥避光环境中，避免与强氧化剂、酸酐类物质接触。

4.2 使用建议：实验操作需在通风橱中进行，佩戴防护手套及护目镜；溶解时建议优先选用惰性有机溶剂（如无水 DMF）。

5. 质量控制与安全信息

5.1 质量控制：通过 HPLC 检测纯度≥96%，核磁共振（1H/13C NMR）和质谱（MS）验证结构。

5.2 安全信息：本品对眼睛和皮肤有刺激性，CAS 号 825-70-7 对应的 GHS 分类为 H315-H319-H335，需参照 SDS 文件规范操作。废弃物处置应遵守当地化学品管理法规。

（注：本说明基于现有研究数据编制，实际应用前请进行充分验证。）