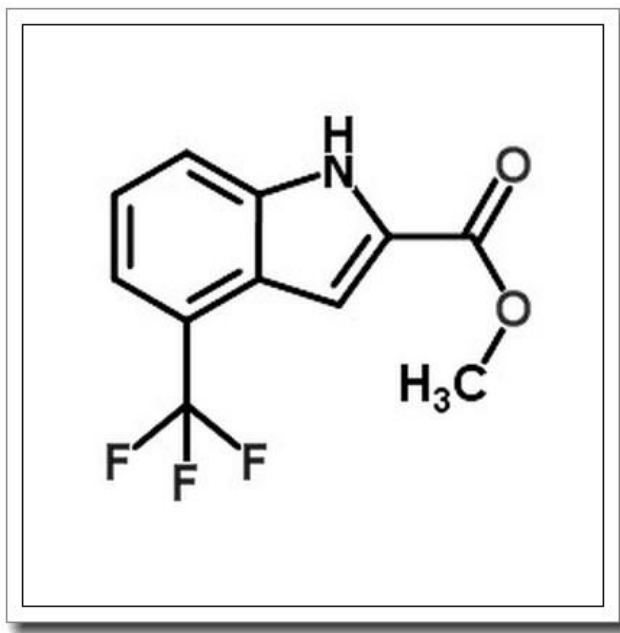


4-(三氟甲基)-1H-吲哚-2-羧酸甲酯

Methyl 4-(trifluoromethyl)-1H-indole-2-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Methyl 4-(trifluoromethyl)-1H-indole-2-carboxylate
中文名称	4-(三氟甲基)-1H-吲哚-2-羧酸甲酯
CAS 号	1098340-27-2
分子式	C ₁₁ H ₈ F ₃ N ₂ O ₂
分子量	243.182
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

4-(三氟甲基)-1H-吲哚-2-羧酸甲酯 (Methyl 4-(trifluoromethyl)-1H-indole-2-carboxylate) 是一种重要的含氟吲哚衍生物，化学式为 $C_{11}H_8F_3NO_2$ ，分子量为 243.182。该化合物 CAS 号为 1098340-27-2，常温下为白色至类白色结晶或粉末，纯度高于 96%。其结构中的三氟甲基 (-CF₃) 和吲哚环赋予其独特的化学性质，如高电子亲和性和稳定性，使其在有机合成和药物化学中具有广泛的应用潜力。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为吲哚类衍生物，其结构特征使其成为生物活性分子设计中的重要中间体。三氟甲基的引入可显著改变分子的脂溶性、代谢稳定性和生物利用度，因此在药物研发中常用于优化先导化合物的药代动力学性质。此外，吲哚环本身是许多天然产物和药物的核心骨架，如 5-羟色胺类似物和抗炎药物，进一步提升了该化合物的研究价值。

3. 主要应用领域与具体用途

4-(三氟甲基)-1H-吲哚-2-羧酸甲酯主要用于医药和农药领域的研发。在医药化学中，它是合成抗肿瘤、抗病毒和中枢神经系统药物的重要中间体。在农药领域，含氟吲哚衍生物常用于开发高效低毒的杀虫剂和杀菌剂。此外，该化合物还可作为荧光探针或标记物的前体，应用于生物成像和分子诊断研究。

4. 储存条件与使用建议

本品需密封保存于干燥、阴凉的环境中，避免光照和潮湿，推荐储存温度为 2-8° C。长期储存建议充入惰性气体（如氮气）以延长稳定性。使用时需在通风良好的条件下操作，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明，该化合物易溶于二甲基亚砜 (DMSO) 和甲醇，可根据实验需求选择合适的溶剂。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测，纯度 $\geq 96\%$ ，并提供详细的质检报告 (COA)。安全数据表明，该化合物可能对眼睛、皮肤和呼吸系统有刺激性，操作时应佩戴防护手套、护

目镜和防尘口罩。若不慎接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物需按危险化学品处理规范处置，避免环境污染。

以上信息仅供参考，具体应用需结合实验设计和相关法规要求。