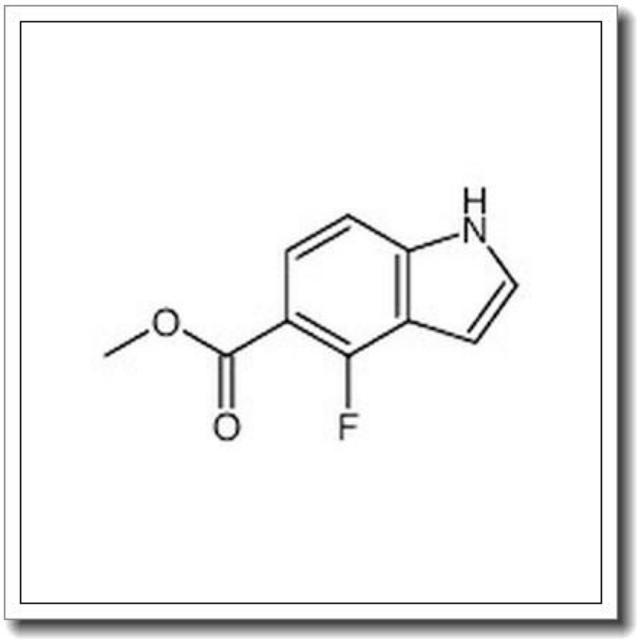
4-氟-1H-吲哚-5-羧酸甲酯

methyl 4-fluoro-1H-indole-5-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	methyl 4-fluoro-1H-indole-5-carboxylate
中文名称	4-氟-1H-吲哚-5-羧酸甲酯
CAS 号	1252782-43-6
分子式	C10H8FNO2
分子量	193.174
纯度	>96%

产品说明

4-氟-1H-吲哚-5-羧酸甲酯产品说明

1. 产品概述与化学特性

4-氟-1H-吲哚-5-羧酸甲酯（英文名：methyl 4-fluoro-1H-indole-5-carboxylate）是一种含氟吲哚类衍生物，CAS 号为 1252782-43-6，分子式为 C10H8FNO2，分子量为 193.174。该化合物为白色至类白色结晶或粉末，纯度高于 96%，具有吲哚环的典型化学性质，同时因氟原子的引入而表现出独特的电子效应和反应活性。

2. 生物化学功能与重要性

作为吲哚类化合物的衍生物，4-氟-1H-吲哚-5-羧酸甲酯在生物化学领域具有重要价值。吲哚结构广泛存在于天然产物和药物分子中，而氟原子的引入可显著改变其生物活性和代谢稳定性。该化合物常用于药物中间体合成，尤其在抗肿瘤、抗炎和神经活性药物的研发中具有潜在应用。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于医药和有机合成领域。具体用途包括：

- 作为关键中间体用于合成含氟吲哚类药物分子。
- 用于结构修饰和构效关系研究，以优化候选化合物的活性与选择性。
- 在材料科学中，可作为功能化分子的构建模块。

4. 储存条件与使用建议

建议将本品置于干燥、避光的环境中，储存温度为 2-8° C。开封后需充入惰性气体（如氮气）保护，以避免吸湿或氧化。使用时需在通风橱中操作，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明，该化合物易溶于有机溶剂（如 DMSO、甲醇），难溶于水。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测，纯度≥96%。安全信息如下：

- 可能对眼睛、皮肤和呼吸道有刺激性，操作时需佩戴防护手套、护目镜和口罩。

- 若不慎接触，应立即用大量清水冲洗，并就医咨询。
- 废弃处理需符合当地化学品管理法规。

本产品仅供科研用途，不适用于临床或食品领域。