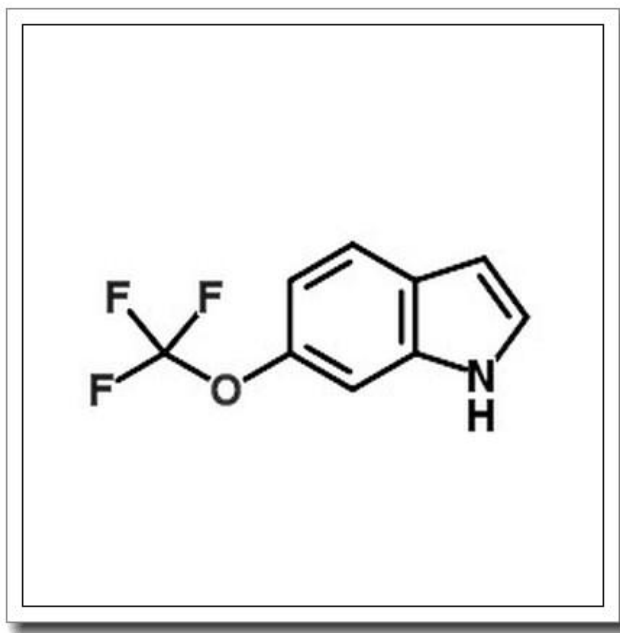


6-三氟甲氧基吲哚

6-(Trifluoromethoxy)-1H-indole



产品基本信息

属性	值
化学名称	6-(Trifluoromethoxy)-1H-indole
中文名称	6-三氟甲氧基吲哚
CAS 号	467451-91-8
分子式	C ₉ H ₆ F ₃ N ₁ O
分子量	201.145
纯度	>96%

产品说明

6-三氟甲氧基吲哚产品说明书

1. 产品概述与化学特性

6-三氟甲氧基吲哚（化学名称：6-(Trifluoromethoxy)-1H-indole, CAS 号：467451-91-8）是一种含氟吲哚衍生物，分子式为 C₉H₆F₃N₀，分子量 201.145。该化合物以吲哚为母核，在 6 位引入三氟甲氧基（-OCF₃）取代基，赋予其独特的电子效应和疏水性。其纯度高于 96%，常温下为白色至类白色结晶或粉末，需避光保存。三氟甲氧基的强吸电子特性使其在化学反应中表现出高稳定性与选择性。

2. 生物化学功能与重要性

作为吲哚类化合物的修饰衍生物，6-三氟甲氧基吲哚在药物化学和材料科学中具有重要价值。吲哚结构广泛存在于天然生物活性分子（如色氨酸、血清素）中，而三氟甲氧基的引入可显著改善其脂溶性、代谢稳定性及与靶标蛋白的结合能力。该结构单元常用于设计中枢神经系统药物、抗炎剂及抗菌剂的先导化合物。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发领域，本品常用于构建含氟杂环化合物库，用于高通量筛选或结构优化研究。具体用途包括：1) 作为关键中间体合成 5-HT 受体调节剂或激酶抑制剂；2) 用于荧光探针开发，利用其吲哚骨架的发光特性；3) 在有机电致发光材料（OLED）中作为电子传输层组分。此外，在农用化学品中亦有潜在应用。

4. 储存条件与使用建议

储存于-20° C 至 4° C 的密闭容器中，避免光照与湿气。长期保存建议充入惰性气体（如氮气）。使用前需恢复至室温并短暂离心以避免结块。溶解性测试表明，本品易溶于二甲基亚砜（DMSO）、二氯甲烷，微溶于乙醇，不溶于水。实验操作应在通风橱中进行，并佩戴防护手套与护目镜。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC 验证纯度 ≥96%，批次间保留时间偏差小于 0.1 分钟。核磁共振（¹H NMR、¹⁹F NMR）与质谱（MS）数据可供备案。安全数据：急性毒性（LD₅₀）未明

确，但需避免吸入粉尘或接触皮肤。如意外接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地有机氟化合物处置法规。

本产品仅限科研用途，不适用于诊断或治疗。购买后请参阅随附的 MSDS（材料安全数据表）获取完整安全信息。