

Methyl 6-chloro-5-fluoro-1H-indole-2-carboxylate

产品图片未找到

产品基本信息

属性	值
化学名称	Methyl 6-chloro-5-fluoro-1H-indole-2-carboxylate
产品目录号	
CAS 号	1067658-29-0
分子式	C10H7C1FN02
分子量	227.62
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为甲基 6-氯-5-氟-1H-吲哚-2-羧酸酯 (Methyl 6-chloro-5-fluoro-1H-indole-2-carboxylate)，化学式为 C₁₀H₇ClFN₂O₂，分子量 227.62，CAS 号 1067658-29-0。外观通常为白色至类白色结晶性粉末，纯度 ≥96%。该化合物属于卤代吲哚衍生物，兼具氯和氟原子的双重卤素取代特性，使其在电子分布和反应活性上表现出显著特异性。其结构中羧酸酯基团增强了分子极性，适合作为有机合成中间体。

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，该产品在药物化学中具有重要价值。吲哚骨架是多种生物活性分子的核心结构，如 5-羟色胺受体调节剂和激酶抑制剂。氯和氟原子的引入可显著改变分子的脂溶性、代谢稳定性及靶标结合能力，常用于先导化合物的结构优化。其在抗肿瘤、抗炎及中枢神经系统药物研发中具有潜在应用前景。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于医药和农药领域的创新研发。在医药方向，可作为合成抗肿瘤药物（如拓扑异构酶抑制剂）或抗抑郁药物的关键中间体；在农药领域，可用于构建具有杀菌或杀虫活性的杂环化合物。此外，其衍生物在荧光探针和材料科学中亦有探索性应用。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 -20° C 至 4° C 的干燥环境中，避免光照和潮湿。开封后需充惰性气体保护以延长稳定性。使用时应在通风橱中操作，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明其易溶于二甲基亚砜 (DMSO) 和甲醇，推荐使用这些溶剂进行后续反应。

5. 质量控制与安全信息

本品通过 HPLC 和 NMR 严格检测，确保杂质含量符合标准。安全数据表明，该化合

物可能对眼睛和皮肤有刺激性，操作时需佩戴防护手套及护目镜。若意外接触，应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置需遵循当地危险化学品管理法规。

（注：实际使用前请查阅最新版物质安全数据表（MSDS）以获取完整安全信息。）