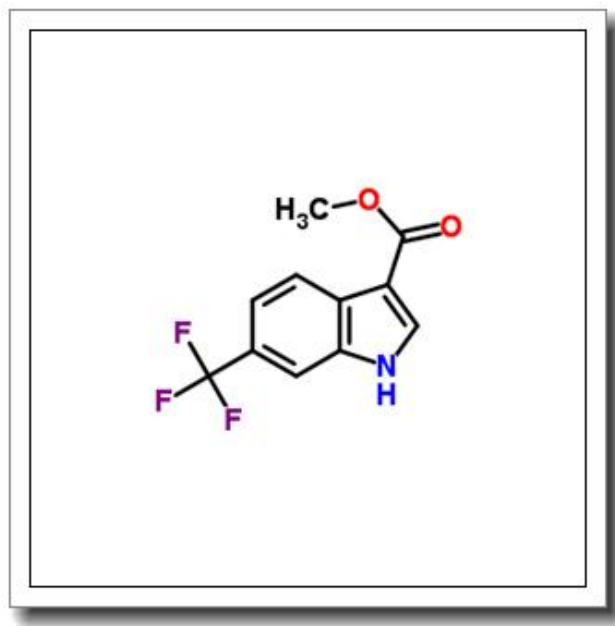


6-(三氟甲基)-1H-吲哚-3-羧酸甲酯

Methyl 6-(trifluoromethyl)-1H-indole-3-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Methyl 6-(trifluoromethyl)-1H-indole-3-carboxylate
中文名称	6-(三氟甲基)-1H-吲哚-3-羧酸甲酯
CAS 号	415918-12-6
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

6-(三氟甲基)-1H-吲哚-3-羧酸甲酯产品说明

1. 产品概述与化学特性

6-(三氟甲基)-1H-吲哚-3-羧酸甲酯 (Methyl 6-(trifluoromethyl)-1H-indole-3-carboxylate) 是一种含三氟甲基取代的吲哚类化合物, CAS 号为 415918-12-6, 分子式为 $C_{11}H_8F_3NO_2$, 分子量为 243.182。本品为白色至类白色结晶或粉末, 纯度 $\geq 96\%$, 具有吲哚环的典型化学性质, 同时三氟甲基的引入增强了其疏水性和电子效应, 使其在有机合成中表现出独特的反应活性。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物是吲哚衍生物的重要中间体, 吲哚结构广泛存在于天然产物和药物分子中, 如 5-羟色胺、褪黑素等。三氟甲基的引入可显著改善化合物的代谢稳定性和生物利用度, 因此在药物化学中常用于先导化合物的结构修饰与优化, 尤其在抗炎、抗肿瘤和中枢神经系统药物研发中具有潜在应用价值。

3. 主要应用领域与具体用途

6-(三氟甲基)-1H-吲哚-3-羧酸甲酯主要用于医药和农药领域的合成研究。在医药领域, 可作为构建杂环化合物的关键砌块, 用于开发新型激酶抑制剂或 G 蛋白偶联受体调节剂。在农药领域, 其衍生物可能具有杀虫或杀菌活性。此外, 它也用于材料科学中功能性分子的合成。

4. 储存条件与使用建议

本品需密封保存于干燥、阴凉处, 避免光照和潮湿环境, 推荐储存温度为 $2-8^{\circ}C$ 。使用时应在通风良好的环境下操作, 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, 部分溶于氯仿, 难溶于水。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测, 纯度 $\geq 96\%$, 并提供 COA (质量分析证书)。安全信息方面, 该化合物可能对眼睛、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。废弃物处置需符合当地环保法规。

以上信息仅供参考，具体应用需结合实验需求进一步验证。