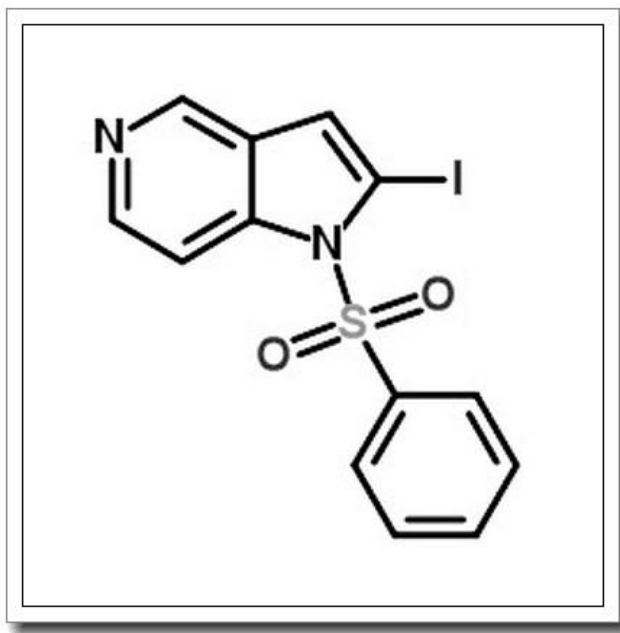


2-碘-1-苯磺酰基-1H-吡咯并[3,2-c]吡啶

1-(benzenesulfonyl)-2-iodopyrrolo[3,2-c]pyridine



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-(benzenesulfonyl)-2-iodopyrrolo[3,2-c]pyridine
中文名称	2-碘-1-苯磺酰基-1H-吡咯并[3,2-c]吡啶
CAS 号	877060-44-1
分子式	C13H9IN2O2S
分子量	384.192
纯度	>96%

产品说明

1-(Benzenesulfonyl)-2-iodopyrrolo[3,2-c]pyridine 产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 1-(苯磺酰基)-2-碘吡咯并[3,2-c]吡啶, CAS 号为 877060-44-1, 分子式为 C₁₃H₉IN₂O₂S, 分子量为 384.192。该化合物是一种含碘杂环芳香族磺酰衍生物, 常温下为白色至淡黄色结晶粉末, 纯度 ≥96%。其结构中的碘原子和吡咯并吡啶骨架赋予其独特的反应活性, 苯磺酰基则增强了化合物的稳定性和溶解性, 适用于有机合成及医药中间体制备。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为高活性中间体, 可通过碘原子的亲电取代反应或过渡金属催化偶联反应(如 Suzuki、Heck 反应)进一步功能化。其吡咯并吡啶结构是多种生物活性分子的核心骨架, 在药物研发中常用于构建激酶抑制剂或抗肿瘤先导化合物。苯磺酰基的引入可调节化合物的脂溶性和细胞膜穿透性, 对优化药物代谢性质具有重要意义。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发和有机合成领域:

- 1) 作为关键中间体用于合成靶向抗癌药物, 特别是蛋白激酶抑制剂类候选化合物;
- 2) 在交叉偶联反应中作为碘代芳烃试剂, 构建 C-C 或 C-N 键;
- 3) 用于荧光探针开发, 其刚性共轭结构可增强荧光信号稳定性;
- 4) 在材料科学中作为有机半导体材料的合成前体。

4. 储存条件与使用建议

储存于-20° C 避光干燥环境中, 惰性气体(如氩气)保护下密封保存。开封后建议分装使用, 避免反复冻融。使用时需在通风橱中操作, 佩戴防护手套及护目镜。溶解性测试表明, 该化合物易溶于二甲基亚砜(DMSO)、二氯甲烷, 微溶于甲醇, 不溶于水。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC 验证纯度 $\geq 96\%$ ，质谱 (MS) 和核磁共振 (NMR) 进行结构确证。安全数据表明，该化合物可能对眼睛和皮肤有刺激性，操作时应避免直接接触。如意外接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物需按危险化学品规范处置。运输分类为 UN2811，需符合 III 类包装标准。

本产品仅供科研用途，不适用于临床或食品领域。具体应用前请查阅最新文献并开展小试实验。