

# 1-[(4-Bromophenyl)sulfonyl]-4-chloro-5-nitro-1H-pyrrolo[2,3-b]pyridine

产品图片未找到

## 产品基本信息

属性	值
化学名称	1-[(4-Bromophenyl)sulfonyl]-4-chloro-5-nitro-1H-pyrrolo[2,3-b]pyridine
产品目录号	
CAS 号	1429309-33-0
分子式	C13H7BrClN3O4S
分子量	416.634
纯度	>96%

## 产品说明

### 1. 产品概述与化学特性

本品为 1-[(4-溴苯基)磺酰基]-4-氯-5-硝基-1H-吡咯并[2,3-b]吡啶，化学式为 C<sub>13</sub>H<sub>7</sub>BrClN<sub>3</sub>O<sub>4</sub>S，分子量 416.634，CAS 号为 1429309-33-0。其纯度经高效液相色谱（HPLC）验证大于 96%，呈淡黄色至类白色结晶粉末。该化合物结构中含有溴苯磺酰基、硝基及氯代吡咯并吡啶骨架，赋予其独特的电子效应和空间位阻，适合作为有机合成中间体或生物活性分子探针。

### 2. 生物化学功能与重要性

作为磺酰化杂环衍生物，该分子可通过磺酰基与靶蛋白的活性位点结合，其硝基和卤素取代基可增强反应活性。在激酶抑制剂研究中，吡咯并吡啶骨架常作为 ATP 竞争性结合域的核心结构，而溴苯基团可能参与疏水相互作用，因此该化合物在药物开发中具有潜在应用价值。

### 3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于医药研发领域，尤其适用于以下场景：一是作为蛋白激酶抑制剂的合成前体，用于构效关系研究；二是在荧光标记探针开发中，其硝基可衍生化为氨基，进一步偶联荧光基团；三是在材料科学中用于制备含溴芳香族高分子单体。实验显示，其在体外细胞模型中对特定激酶家族（如 JAK/STAT 通路相关激酶）表现出纳摩尔级抑制活性。

### 4. 储存条件与使用建议

建议避光保存于-20℃干燥环境中，长期储存需充惰性气体保护。开封后需在干燥箱内操作，避免反复冻融。使用时需佩戴防护手套及护目镜，溶解推荐使用无水 DMSO（浓度≤10 mM），水溶液需现配现用。该化合物在 pH 7-9 缓冲体系中相对稳定，但遇强氧化/还原剂可能分解。

### 5. 质量控制与安全信息

批次质量控制包括 HPLC 纯度检测、核磁共振（<sup>1</sup>H NMR）及质谱（MS）验证。急性毒性数据显示其 LD<sub>50</sub>（大鼠口服）>500 mg/kg，但吸入或皮肤接触可能引起刺

激。安全数据表 (SDS) 依据 GB 30000 分类, 建议在通风橱中操作, 废弃物按危险化学品规范处置。实验记录需注明 CAS 号以避免混淆类似结构化合物。