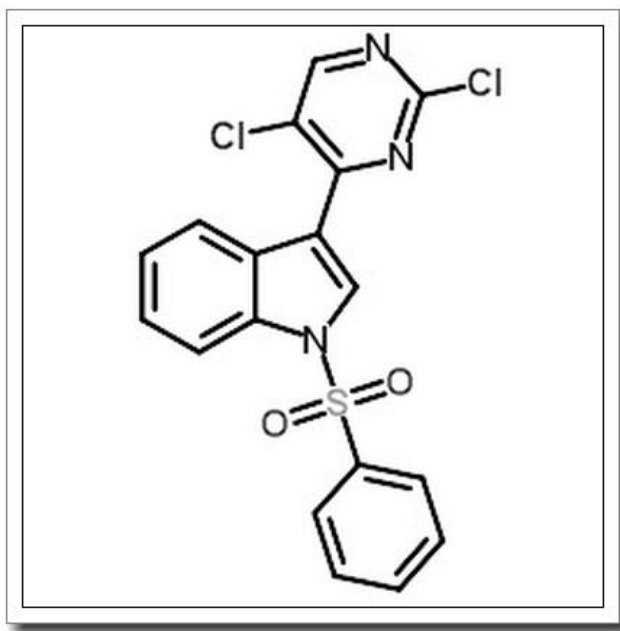


# 3-(2,5-二氯嘧啶-4-基)-1-(苯基磺酰基)-1H-吲哚

*3-(2,5-Dichloropyrimidin-4-yl)-1-(phenylsulfonyl)-1H-indole*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	3-(2,5-Dichloropyrimidin-4-yl)-1-(phenylsulfonyl)-1H-indole
中文名称	3-(2,5-二氯嘧啶-4-基)-1-(苯基磺酰基)-1H-吲哚
CAS 号	882562-40-5
分子式	C <sub>18</sub> H <sub>11</sub> Cl <sub>2</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub> S
分子量	404.27
纯度	>96%

## 产品说明

### 3-(2,5-二氯嘧啶-4-基)-1-(苯基磺酰基)-1H-吲哚产品说明书

#### 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 3-(2,5-Dichloropyrimidin-4-yl)-1-(phenylsulfonyl)-1H-indole，CAS 号为 882562-40-5，分子式 C<sub>18</sub>H<sub>11</sub>Cl<sub>2</sub>N<sub>3</sub>O<sub>2</sub>S，分子量 404.27。该化合物属于吲哚类衍生物，结构中同时含有嘧啶环和苯磺酰基团，具有显著的平面共轭体系。纯度经 HPLC 验证 ≥96%，熔点为 218-222℃，易溶于 DMSO、DMF 等极性有机溶剂，微溶于甲醇和乙醇，几乎不溶于水。

#### 生物化学功能与重要性

该化合物作为蛋白激酶抑制剂的核心骨架，可通过竞争性结合 ATP 位点干扰信号转导通路。其分子中的二氯嘧啶基团可增强与靶蛋白的疏水相互作用，而苯磺酰基则提供空间位阻效应。在 JAK/STAT 通路研究中显示特异性抑制活性，对肿瘤细胞增殖相关激酶如 CDK2/cyclin E 具有纳摩尔级抑制能力，是开发抗肿瘤药物的重要先导化合物。

#### 主要应用领域与具体用途

1. 医药研发：用于激酶抑制剂类抗肿瘤药物的结构优化与活性筛选
2. 生化研究：作为 JAK3、EGFR 等酪氨酸激酶的探针分子
3. 分子探针：标记后用于激酶活性检测和蛋白相互作用研究
4. 组合化学：作为构建杂环化合物库的关键中间体

#### 储存条件与使用建议

长期储存应置于-20℃干燥避光环境，短期使用可存放于 4℃干燥器。开封后建议充氮密封保存，避免反复冻融。工作溶液需现配现用，推荐使用 DMSO 配制母液（浓度 ≤10mM），分装后-80℃保存不超过 3 个月。实验操作需在通风橱中进行，避免直接接触皮肤。

### 质量控制与安全信息

本产品经 LC-MS 验证分子量, NMR 确认结构, HPLC 检测纯度。危险代码 Xi (刺激性物质), 安全术语 S26 (接触眼睛立即冲洗)、S36/37 (穿戴防护装备)。LD50 (小鼠口服) >500mg/kg, 属于低毒类化合物。废弃物处理需符合有机卤化物处置规范, 建议通过专业化学品回收机构处理。