

3-iodo-1-tosyl-1H-indole-5-carbonitrile

产品图片未找到

产品基本信息

属性	值
化学名称	3-iodo-1-tosyl-1H-indole-5-carbonitrile
产品目录号	
CAS 号	676273-39-5
分子式	C ₁₆ H ₁₁ IN ₂ O ₂ S
分子量	422.24
纯度	>96%

产品说明

3-iodo-1-tosyl-1H-indole-5-carbonitrile 产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为高纯度有机化合物，化学名称为 3-碘-1-对甲苯磺酰基-1H-吲哚-5-甲腈，CAS 号为 676273-39-5，分子式为 C₁₆H₁₁N₂O₂S，分子量为 422.24。该化合物为白色至淡黄色结晶性粉末，纯度经 HPLC 验证大于 96%。其结构特征为吲哚环 5 位上的氰基取代和 3 位碘原子修饰，1 位氮原子被对甲苯磺酰基保护，赋予其独特的反应活性和稳定性。

2. 生物化学功能与重要性

作为吲哚类衍生物，该化合物是构建复杂杂环骨架的重要中间体，尤其在药物化学领域具有显著价值。碘原子的引入增强了其作为亲电试剂的交叉偶联反应能力（如 Suzuki 偶联），而对甲苯磺酰基的位点保护特性使其在选择性合成中发挥关键作用。氰基的强吸电子效应可进一步调控分子极性，适用于靶向修饰和结构优化。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药研发和有机合成领域：

- 作为抗肿瘤、抗病毒药物先导化合物的核心骨架
- 用于 Pd 催化偶联反应构建 C-C 键的碘代前体
- 在荧光探针开发中作为功能化吲哚衍生物的合成模块
- 作为激酶抑制剂或 GPCR 配体的结构单元

4. 储存条件与使用建议

建议在-20℃、避光、干燥惰性气体（如氩气）环境下长期储存。开封后需密封保存于原装容器中，避免反复冻融。使用时应在通风橱中操作，推荐以无水 DMSO 或 DMF 为溶剂配制母液（浓度≤10 mM），现配现用。

5. 质量控制与安全信息

本产品经质谱（MS）和核磁共振（NMR）双重验证，符合 ACS 级标准。安全数据表明其具有刺激性，操作时需佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩。急性毒性 LD₅₀

(大鼠口服) 为 320 mg/kg, 属于有害化学品。废弃物处置需遵循当地危险化学品管理条例, 禁止直接排入下水道。

(注: 本说明基于现有研究数据编制, 具体应用需结合实验条件优化。更多技术参数可索取 COA 报告。)