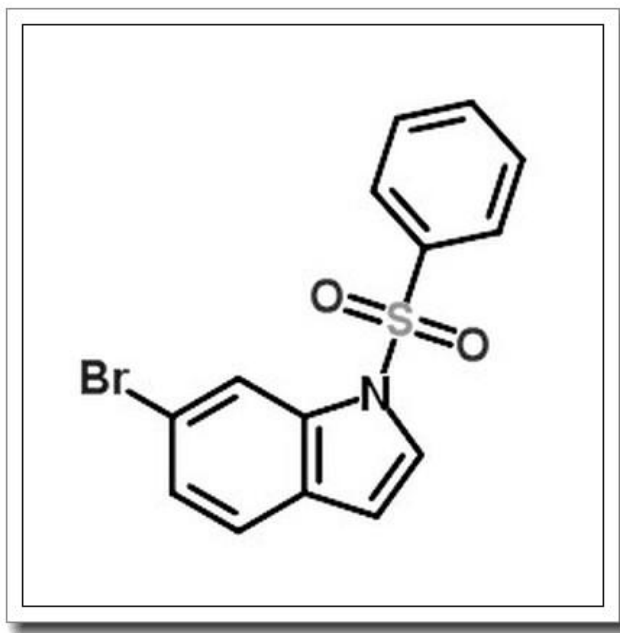


# 6-溴-1-苯基磺酰基-1H-吲哚

*6-Bromo-1-(phenylsulfonyl)-1H-indole*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	6-Bromo-1-(phenylsulfonyl)-1H-indole
中文名称	6-溴-1-苯基磺酰基-1H-吲哚
CAS 号	679794-03-7
分子式	C <sub>14</sub> H <sub>10</sub> BrN <sub>0</sub> S <sub>2</sub>
分子量	336.204
纯度	>96%

## 产品说明

### 6-溴-1-苯基磺酰基-1H-吲哚产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

6-溴-1-苯基磺酰基-1H-吲哚（英文名：6-Bromo-1-(phenylsulfonyl)-1H-indole）是一种重要的有机合成中间体，CAS 号为 679794-03-7，分子式为  $C_{14}H_{10}BrNO_2S$ ，分子量为 336.204。该化合物为白色至淡黄色结晶性粉末，纯度高于 96%，具有吲哚环结构，并在 6 位引入溴原子，1 位连接苯磺酰基团，赋予其独特的化学反应活性。其结构特点使其在亲电取代和过渡金属催化偶联反应中表现出优异的应用潜力。

#### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为吲哚衍生物，在药物化学和材料科学领域具有重要价值。吲哚骨架广泛存在于天然生物活性分子中，而苯磺酰基的引入可增强化合物的稳定性和溶解性，6 位溴原子则为后续功能化修饰提供了关键位点。其在激酶抑制剂、抗肿瘤药物先导化合物开发中常作为核心结构单元，同时也是研究蛋白质-配体相互作用的重要工具分子。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

6-溴-1-苯基磺酰基-1H-吲哚主要用于以下领域：

- 3.1 医药研发：作为关键中间体用于合成靶向抗癌药物（如 BRD4 抑制剂）和抗炎化合物。
- 3.2 材料科学：参与构建有机光电材料的功能性吲哚骨架，如 OLED 发光层材料前体。
- 3.3 化学合成：通过 Suzuki 偶联、Buchwald-Hartwig 胺化等反应进一步衍生化，制备复杂杂环体系。

#### 4. 储存条件与使用建议

- 4.1 储存条件：需密封保存于干燥、避光环境中，建议温度范围为 2-8°C，长期储存建议充入惰性气体保护。

4.2 使用建议：操作时需在通风橱中进行，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明其易溶于二甲基亚砷（DMSO）、二氯甲烷等有机溶剂，水溶性较差，建议根据反应体系选择适宜溶剂。

#### 5. 质量控制与安全信息

5.1 质量控制：通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，核磁共振（ $^1\text{H}$  NMR、 $^{13}\text{C}$  NMR）和质谱（MS）验证结构准确性。

5.2 安全信息：该化合物对眼睛和皮肤有刺激性，操作时应佩戴防护手套及护目镜。若意外接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地危险化学品管理规定，不可直接排入下水道。

本产品仅供科研用途，不适用于医药、食品或家庭使用。具体应用前请查阅最新文献并开展小试实验验证。