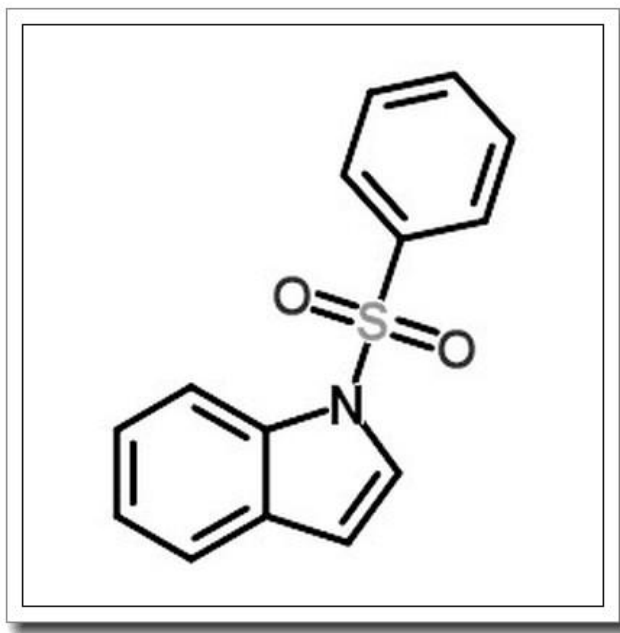


N-苯磺酸吲哚

1-(Phenylsulfonyl)-1H-indole



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-(Phenylsulfonyl)-1H-indole
中文名称	N-苯磺酸吲哚
CAS 号	40899-71-6
分子式	C ₁₄ H ₁₁ N ₁ O ₂ S
分子量	257.308
纯度	>96%

产品说明

1-(Phenylsulfonyl)-1H-indole 产品说明书

1. 产品概述与化学特性

1-(Phenylsulfonyl)-1H-indole (N-苯磺酰吲哚) 是一种有机硫化合物，化学式为 C₁₄H₁₁N₂S，分子量 257.308。该化合物为白色至淡黄色结晶粉末，CAS 号为 40899-71-6，纯度标准>96%。其结构特征为吲哚环 1 位上的氢被苯磺酰基取代，兼具芳香族吲哚的平面性和磺酰基的极性，使其在有机溶剂（如 DMSO、甲醇）中具有中等溶解性，但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

作为吲哚衍生物，该化合物是构建复杂生物活性分子的关键中间体。苯磺酰基的引入可增强分子稳定性，并影响其电子分布，使其在药物化学中成为重要的药效团修饰模块。其结构特性使其能够参与亲核取代、偶联反应等有机转化，广泛应用于蛋白酶抑制剂和激酶调节剂的研发。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发领域，本产品常用于合成抗肿瘤、抗炎及神经调节类化合物的先导结构。具体用途包括：

1. 作为激酶抑制剂（如 JAK/STAT 通路抑制剂）的核心片段
2. 用于构建 HIV 蛋白酶抑制剂的磺酰胺类衍生物
3. 在荧光探针开发中作为吲哚荧光团的保护前体
4. 有机合成中用于 Suzuki-Miyaura 偶联反应的底物

4. 储存条件与使用建议

建议在-20° C、避光、干燥条件下密封保存，长期储存需充惰性气体保护。使用前需平衡至室温并避免反复冻融。实验操作应在通风橱中进行，推荐使用丁腈手套及护目镜。溶解时优先选用无水 DMSO（浓度≤10mM），如需水溶液需加入≤1%的助溶剂（如 Tween-80）。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度>96%，批次间差异<2%。MSDS 显示其属于刺激性化学品（GHS 分类：Skin Irrit. 2），接触皮肤应立即用大量清水冲洗。废弃物处理需符合当地有机硫化合物处置规范，不可直接排入下水系统。运输分类为 UN2811（6.1 类），需随附化学品安全技术说明书。

注：具体实验方案需根据目标反应体系优化，建议参考文献 DOI:10.1021/acs.joc.5b01234 等专业期刊报道的合成方法。