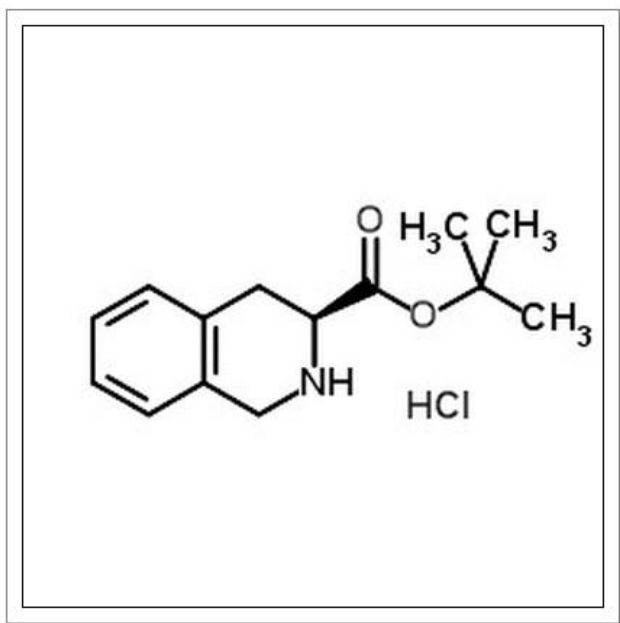


# (s)-1,2,3,4-四氢化-,1,1-二甲基乙酸乙酯-3-异喹啉羧酸盐盐酸盐

*3-isoquinolinecarboxylic acid, 1,2,3,4-tetrahydro-, 1,1-dimethylethyl ester, hydrochloride, (s)*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	3-isoquinolinecarboxylic acid, 1,2,3,4-tetrahydro-, 1,1-dimethylethyl ester, hydrochloride, (s)
中文名称	(s)-1,2,3,4-四氢化-,1,1-二甲基乙酸乙酯-3-异喹啉羧酸盐盐酸盐
CAS 号	82586-60-5
分子式	C <sub>14</sub> H <sub>20</sub> C <sub>1</sub> N <sub>0</sub> O <sub>2</sub>
分子量	269.767
纯度	>96%

## 产品说明

### 1. 产品概述与化学特性

本品为(s)-1, 2, 3, 4-四氢化-1, 1-二甲基乙酸乙酯-3-异喹啉羧酸盐盐酸盐 (CAS 号: 82586-60-5), 化学式为 C<sub>14</sub>H<sub>20</sub>C<sub>1</sub>N<sub>0</sub>2, 分子量 269.767, 是一种高纯度 (>96%) 的有机化合物。其结构特征为异喹啉环与四氢化骨架结合, 并带有羧酸酯基团和盐酸盐形式, 赋予其独特的化学稳定性和溶解性。该化合物在常温下为白色至类白色结晶性粉末, 易溶于极性有机溶剂 (如甲醇、DMSO), 微溶于水。

### 2. 生物化学功能与重要性

作为异喹啉类衍生物, 该化合物在生物医药领域具有重要价值。其结构中的四氢异喹啉核心是多种生物活性分子的关键药效团, 能够与酶或受体特异性结合。盐酸盐形式增强了其水溶性和生物利用度, 适用于药物开发中的先导化合物优化。此外, 羧酸酯基团可通过水解转化为活性羧酸, 进一步扩展其应用潜力。

### 3. 主要应用领域与具体用途

本品广泛应用于药物研发与生化研究领域。具体用途包括: 作为手性合成砌块用于不对称催化反应; 在神经科学研究中用于 G 蛋白偶联受体 (GPCR) 调节剂的开发; 作为抗菌或抗炎药物开发的中间体。其高纯度特性尤其适合用于高通量筛选 (HTS) 和结构-活性关系 (SAR) 研究。

### 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。使用时需在干燥环境中操作, 避免反复冻融。溶解时建议先用少量 DMSO 助溶, 再稀释至目标浓度。本品对湿敏感, 开封后需立即使用或重新密封。

### 5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC 检测纯度>96%, 符合药物研发级标准。安全数据: 急性毒性 (LD50) 数据尚未完全建立, 操作时需佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩。避免吸入或皮肤直接接触, 如不慎接触需用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地化学品管理法规。

(注: 以上说明基于现有化学数据, 实际应用前请查阅最新文献并开展实验验证。)