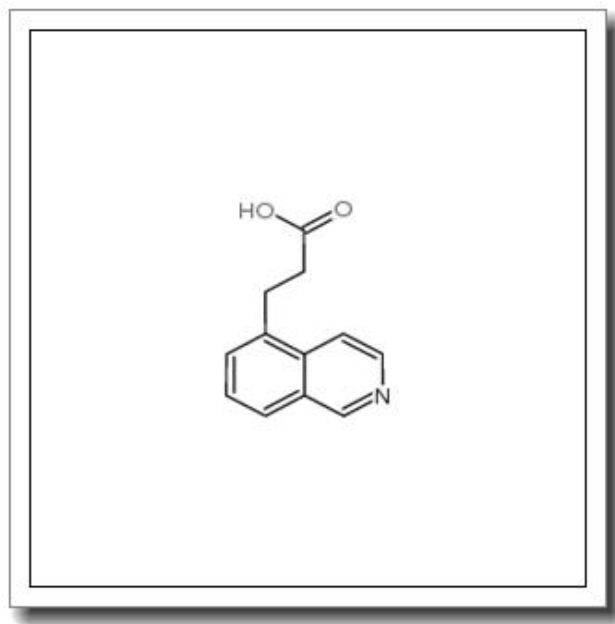


5-异喹啉丙酸

3-isoquinolin-5-ylpropanoic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-isoquinolin-5-ylpropanoic acid
中文名称	5-异喹啉丙酸
CAS 号	87087-28-3
分子式	C ₁₂ H ₁₁ N ₂ O ₂
分子量	201.221
纯度	≥ 96%

产品说明

5-异喹啉丙酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

5-异喹啉丙酸 (3-isoquinolin-5-ylpropanoic acid) 是一种含氮杂环羧酸衍生物，化学式为 $C_{12}H_{11}NO_2$ ，分子量 201.221，CAS 号为 87087-28-3。本品为白色至类白色结晶性粉末，纯度 $\geq 96\%$ ，可溶于有机溶剂如 DMSO 和甲醇，微溶于水。其结构中的异喹啉环与丙酸侧链赋予其独特的酸碱两性和分子识别特性，是合成医药中间体及功能材料的重要砌块。

2. 生物化学功能与重要性

作为异喹啉类生物碱的结构类似物，5-异喹啉丙酸可通过氢键和 $\pi - \pi$ 堆积作用与生物大分子相互作用。其羧酸基团可参与酯化、酰胺化等反应，而异喹啉环可作为荧光探针或金属离子配体。该化合物在调控酶活性和信号通路研究中具有潜在价值，尤其在神经退行性疾病相关靶点研究中受到关注。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药领域，本品用于合成抗肿瘤、抗炎及中枢神经系统药物先导化合物；在材料科学中，可作为有机发光二极管 (OLED) 的电子传输层前体。实验室常用作：

- 激酶抑制剂结构修饰的关键中间体
- 金属有机框架 (MOF) 材料的功能性 linker
- 荧光标记物的合成原料

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 $-20^{\circ}C$ 干燥环境中，避免光照及吸湿。开启后需充惰性气体保护。使用前需恢复至室温平衡，称量应在通风橱中进行。推荐用无水乙醇或 DMSO 配制母液 (浓度 ≤ 10 mM)，现配现用。与强氧化剂、强碱需隔离存放。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC 检测纯度，批号关联 COA 报告。本品对眼睛和呼吸道有轻微刺激性，操

作时应佩戴护目镜、防尘口罩及丁腈手套。若接触皮肤，立即用大量清水冲洗 15 分钟。废弃物需按危险化学品规范处置。

（注：本说明基于当前研究数据，实际应用前请查阅最新文献并开展小试验证。）