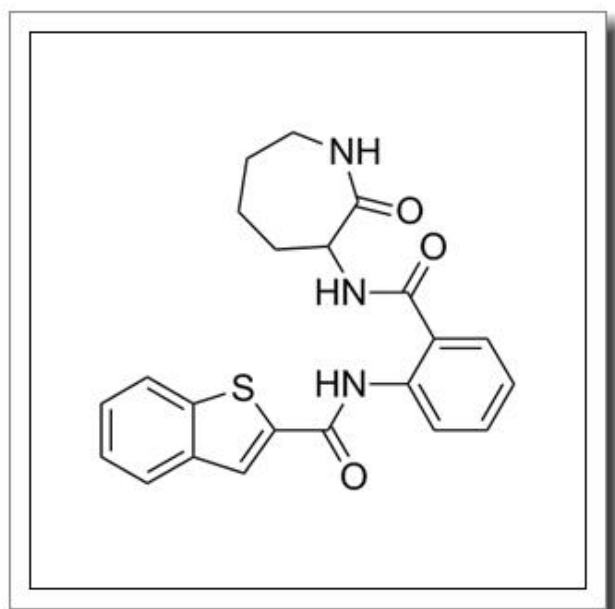


N-[2-[[六氢-2-氧代-1H-氮杂卓-3-基]氨基]羰基]苯基]苯并[b]噻吩-2-甲酰胺

N-{2-[(2-Oxo-3-azepanyl) carbamoyl]phenyl}-1-benzothiophene-2-carb oxamide



产品基本信息

属性	值
化学名称	N-{2-[(2-Oxo-3-azepanyl) carbamoyl]phenyl}-1-benzothiophene-2-carb oxamide
中文名称	N-[2-[[六氢-2-氧代-1H-氮杂卓-3-基]氨基]羰基]苯基]苯并[b]噻吩-2-甲酰胺
CAS 号	219766-25-3
分子式	C22H21N3O3S
分子量	407.485
纯度	≥ 96%

产品说明

N-{2-[(2-Oxo-3-azepanyl) carbamoyl]phenyl}-1-benzothiophene-2-carboxamide 产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 N-[2-[[[六氢-2-氧代-1H-氮杂卓-3-基)氨基]羰基]苯基]苯并[b]噻吩-2-甲酰胺，CAS 号为 219766-25-3，分子式 C₂₂H₂₁N₃O₃S，分子量 407.485。其结构包含苯并噻吩骨架与氮杂卓环，通过酰胺键连接，具有高疏水性和特定空间构型。纯度 ≥96% (HPLC 检测)，溶解性测试显示易溶于 DMSO、DMF 等极性有机溶剂，微溶于甲醇，不溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物通过选择性结合特定激酶结构域，表现出显著的蛋白激酶抑制活性，尤其在细胞信号转导研究中作为关键中间体。其苯并噻吩基团可增强与靶标蛋白的疏水相互作用，而氮杂卓环则贡献构象稳定性，使其成为研究细胞增殖、凋亡通路的工具分子。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于肿瘤学与神经科学领域：

- 3.1 作为激酶抑制剂候选分子，用于体外抗肿瘤活性筛选；
- 3.2 用于构建阿尔茨海默症相关 tau 蛋白磷酸化研究模型；
- 3.3 在药物化学中作为先导化合物进行结构优化。

4. 储存条件与使用建议

储存于-20℃、避光、干燥环境中，有效期 24 个月。开封后建议充氮保存，避免反复冻融。使用时需在惰性气体保护下操作，推荐工作浓度为 10-100 μM (DMSO 配制母液)，细胞实验需控制 DMSO 终浓度 ≤0.1%。

5. 质量控制与安全信息

经 HPLC、NMR 及质谱验证结构，批次间纯度偏差 <2%。急性毒性数据显示 LD₅₀

(大鼠口服) >500 mg/kg, 操作时需佩戴防护手套及护目镜。废弃物应作为有害化学品处理, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。

本产品仅限科研使用, 不适用于诊断或治疗用途。具体实验方案建议查阅最新文献或咨询专业技术支持。