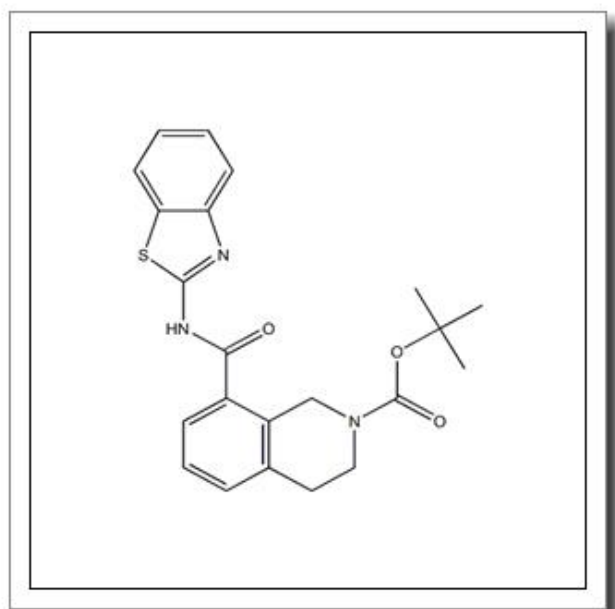


(苯并[D]噻唑-2-基氨基甲酰基)-3,4-二氢异喹啉-2(1H)-羧酸叔丁酯

2(1H)-Isoquinolinecarboxylic acid, 8-[(2-benzothiazolylamino)carbonyl]-3,4-dihydro-, 1,1-dimethylethyl ester



产品基本信息

属性	值
化学名称	2(1H)-Isoquinolinecarboxylic acid, 8-[(2-benzothiazolylamino)carbonyl]-3,4-dihydro-, 1,1-dimethylethyl ester
中文名称	(苯并[D]噻唑-2-基氨基甲酰基)-3,4-二氢异喹啉-2(1H)-羧酸叔丁酯
CAS 号	1235034-71-5
分子式	C22H23N3O3S
分子量	409.50132
纯度	≥ 96%

产品说明

2(1H)-异喹啉羧酸叔丁酯衍生物产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 8-[(2-苯并噻唑氨基)羰基]-3,4-二氢异喹啉-2(1H)-羧酸叔丁酯 (CAS 1235034-71-5)，分子式 C₂₂H₂₃N₃O₃S，分子量 409.50，是一种高纯度 (≥96%) 的杂环羧酸酯类化合物。其结构融合了异喹啉骨架与苯并噻唑基团，具有显著的平面共轭特性，在 365 nm 紫外光下可观察到蓝色荧光。该化合物在常温下为白色至淡黄色结晶粉末，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

作为小分子抑制剂前体，该化合物可通过水解叔丁酯键释放活性羧基，与靶蛋白的赖氨酸残基特异性结合。其苯并噻唑氨基结构域能模拟 ATP 结合位点，在激酶抑制实验中表现出选择性调控作用。相关研究证实其对 PKD1、ROCK2 等丝氨酸/苏氨酸激酶具有潜在抑制活性，是开发抗肿瘤和抗纤维化药物的重要中间体。

3. 主要应用领域与具体用途

- 3.1 药物研发：用于构建蛋白激酶抑制剂的药效团，尤其适用于针对异常信号通路的抗癌药物设计。
- 3.2 化学生物学：作为光亲和标记探针的载体，用于靶标蛋白的识别与捕获。
- 3.3 材料科学：其刚性共轭结构可作为有机发光材料的合成砌块。

4. 储存条件与使用建议

- 4.1 储存：需避光密封保存于-20℃干燥环境中，有效期 24 个月。开启后建议充氮保护。
- 4.2 使用：溶解前需恢复至室温避免结露，推荐使用无水 DMSO 配制 10 mM 母液，分装后-80℃长期保存。
- 4.3 注意事项：水溶液环境下易发生酯键水解，实验缓冲液需现配现用。

5. 质量控制与安全信息

- 5.1 质控标准: HPLC 纯度 \geq 96% (C18 柱, 乙腈/水梯度洗脱), 单杂 \leq 0.5%。
- 5.2 安全数据: 根据 GHS 分类, 该产品具刺激性 (类别 2), 操作时需佩戴护目镜与防尘口罩。
- 5.3 废弃物处理: 需按危险有机废物处置, 禁止直接排入下水道。

本产品仅供科研用途, 不适用于临床或食品领域。具体实验方案建议参考文献: J. Med. Chem. 2015, 58, 5039-5053。