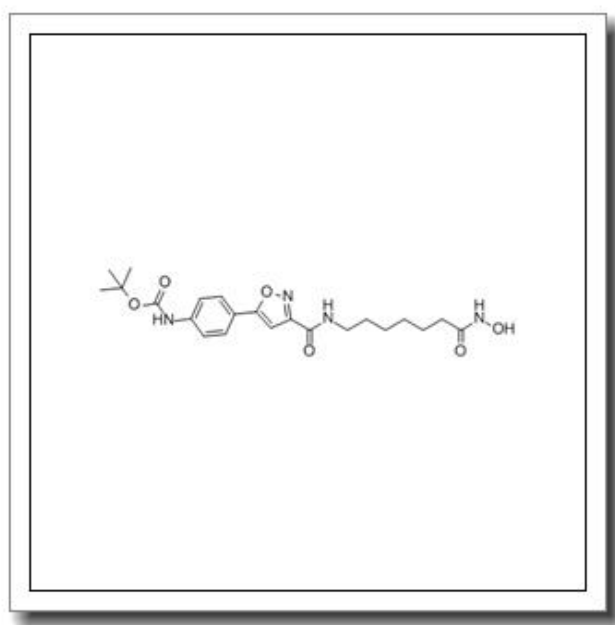


# N-[4-[3-[[[7-(羟基氨基)-7-氧代庚基]氨基]羰基]-5-异恶唑基]苯基]氨基甲酸叔丁酯

*tert-butyl N-[4-[3-[[7-(hydroxyamino)-7-oxoheptyl]carbamoyl]-1,2-oxazol-5-yl]phenyl]carbamate*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	<i>tert-butyl N-[4-[3-[[7-(hydroxyamino)-7-oxoheptyl]carbamoyl]-1,2-oxazol-5-yl]phenyl]carbamate</i>
中文名称	N-[4-[3-[[[7-(羟基氨基)-7-氧代庚基]氨基]羰基]-5-异恶唑基]苯基]氨基甲酸叔丁酯
CAS 号	1045792-66-2
分子式	C <sub>22</sub> H <sub>30</sub> N <sub>4</sub> O <sub>6</sub>
分子量	446.497

纯度	$\geq 96\%$
----	-------------

## 产品说明

### 1. 产品概述与化学特性

本品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 tert-butyl N-[4-[3-[[7-(hydroxyamino)-7-oxoheptyl]carbamoyl]-1,2-oxazol-5-yl]phenyl]carbamate (CAS 号 1045792-66-2)，分子式 C<sub>22</sub>H<sub>30</sub>N<sub>4</sub>O<sub>6</sub>，分子量 446.497。其结构中包含叔丁氧羰基 (Boc) 保护基、异恶唑环及羟胺衍生物片段，赋予其独特的化学稳定性和生物活性。纯度 ≥96% (HPLC)，易溶于二甲基亚砜 (DMSO)，微溶于甲醇，不溶于水。

### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物是一种小分子抑制剂，通过特异性靶向组蛋白去乙酰化酶 (HDAC) 发挥调控基因表达的作用。其羟胺基团可螯合金属离子，干扰酶活性中心的催化功能，在表观遗传学研究中具有重要价值。此外，Boc 保护基的存在增强了化合物的细胞膜穿透性，适用于体外细胞实验。

### 3. 主要应用领域与具体用途

作为 HDAC 抑制剂，广泛应用于肿瘤学、神经退行性疾病及炎症机制研究：

- 肿瘤治疗研究：诱导癌细胞分化与凋亡
- 神经科学：调控 tau 蛋白乙酰化水平以研究阿尔茨海默病
- 药物开发：作为先导化合物用于新型 HDAC 抑制剂设计
- 体外实验：推荐工作浓度 0.1-10 μM (需预实验优化)

### 4. 储存条件与使用建议

储存于-20℃干燥避光环境，有效期 24 个月。开封后建议分装保存，避免反复冻融。使用时需佩戴防护手套，在通风橱中操作。配制母液优先选用 DMSO (建议浓度 10 mM)，分装后-80℃长期保存，避免水溶液体系直接配制。

### 5. 质量控制与安全信息

经 HPLC、NMR 及质谱三重验证，批次间一致性误差 <2%。急性毒性数据 (大鼠口服 LD<sub>50</sub>) >500 mg/kg，属于刺激性物质 (GHS 分类: Eye Irrit. 2)。如接触皮肤，

立即用大量清水冲洗 15 分钟；若吸入粉尘，转移至空气新鲜处。废弃物处理需符合危险化学品处置规范。

注：本产品仅限科研用途，不可用于人体或临床治疗。实验方案需经伦理委员会审批后执行。