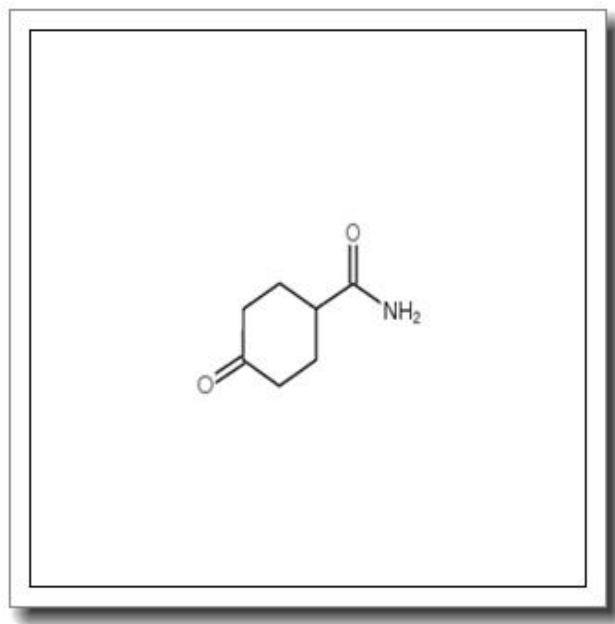


4-氧代环己烷羧酰胺

4-oxocyclohexane-1-carboxamide



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-oxocyclohexane-1-carboxamide
中文名称	4-氧代环己烷羧酰胺
CAS 号	204136-88-9
分子式	C ₇ H ₁₁ N ₂ O ₂
分子量	141.168
纯度	≥ 96%

产品说明

4-氧代环己烷羧酰胺产品说明书

1. 产品概述与化学特性

4-氧代环己烷羧酰胺（化学名称：4-oxocyclohexane-1-carboxamide，CAS 号：204136-88-9）是一种环状酰胺类化合物，分子式为 $C_7H_{11}NO_2$ ，分子量为 141.168。本品为白色至类白色结晶性粉末，纯度 $\geq 96\%$ ，具有典型的酰胺键特征吸收峰（红外光谱验证）。其结构中包含环己酮骨架和羧酰胺基团，使其兼具酮类的反应活性和酰胺的氢键形成能力，在有机合成和药物化学中具有重要价值。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物可作为关键中间体参与多种生物活性分子的合成，其环己酮结构易发生亲核加成反应，而酰胺基团能通过氢键与生物大分子（如酶或受体）相互作用。在药物研发中，此类结构常作为药效团用于设计神经调节剂或抗炎化合物，亦可用于构建杂环化合物库，支持高通量筛选。

3. 主要应用领域与具体用途

4-氧代环己烷羧酰胺广泛应用于医药、农药及材料科学领域。在医药研发中，它是合成 γ -氨基丁酸（GABA）类似物或镇痛剂的重要前体；在农药化学中，可用于构建具有杀虫活性的环己烷衍生物；此外，其刚性环状结构也适用于液晶材料单体的制备。实验室中常作为不对称合成的手性模板或催化剂配体。

4. 储存条件与使用建议

本品需密封保存于干燥、避光环境中，推荐储存温度为 $2-8^{\circ}C$ 。长期存放建议充氮保护以防氧化。使用时需在通风橱中操作，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明，其易溶于极性有机溶剂（如 DMSO、甲醇），水溶性较低（ < 1 mg/mL），建议先用少量有机溶剂助溶后再稀释至目标浓度。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，残留溶剂符合 USP 标准。MSDS 数据显示其急性毒性较低（LD50 大鼠口服 > 2000 mg/kg），但仍需佩戴防护手套和护目镜。废弃物处

理应遵守当地化学品管理法规，不可直接排入下水道。如发生意外接触，立即用大量清水冲洗并就医。

注：本说明基于现有实验数据编制，实际应用前请结合具体研究需求进行验证。