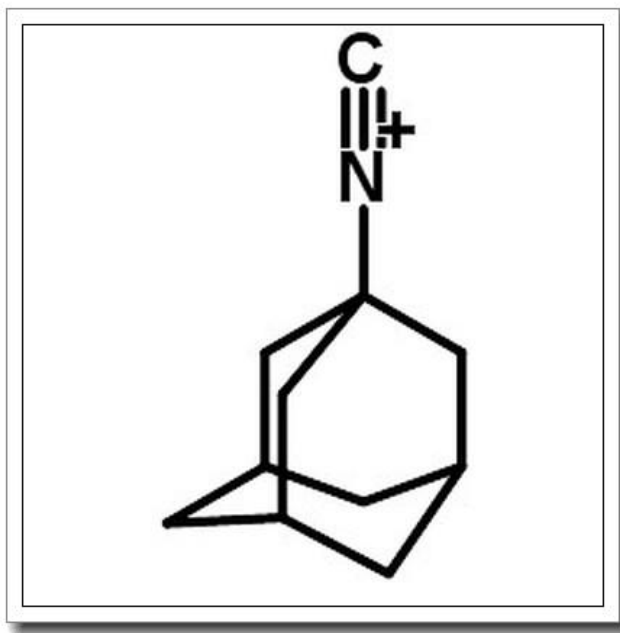


# 1-异氰基金刚烷

*1-isocyanoadamantane*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	1-isocyanoadamantane
中文名称	1-异氰基金刚烷
CAS 号	22110-53-8
分子式	C <sub>11</sub> H <sub>15</sub> N
分子量	161. 243
纯度	>96%

## 产品说明

### 1-异氰基金刚烷产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

1-异氰基金刚烷 (1-isocyanoadamantane) 是一种具有刚性金刚烷骨架的异氰酸酯类化合物，化学式为  $C_{11}H_{15}N$ ，分子量 161.243，CAS 号为 22110-53-8。其结构中包含高反应活性的异氰酸酯基团 ( $-N=C=O$ )，与金刚烷的立体稳定性相结合，赋予该分子独特的化学性质。本品为白色至类白色固体，纯度 >96%，需在干燥惰性气氛下保存以避免水解或聚合反应。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为金刚烷衍生物，1-异氰基金刚烷兼具疏水性与位阻效应，其异氰酸酯基团可作为关键反应位点，与氨基、羟基等亲核基团发生加成反应，形成脲或氨基甲酸酯结构。这一特性使其在药物化学中成为重要的中间体，尤其在构建具有空间约束作用的药效团时表现出显著优势。此外，其刚性结构有助于增强目标分子的代谢稳定性。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于以下领域：

- (1) 医药研发：用于合成抗病毒、神经保护剂等金刚烷类衍生物，例如流感治疗药物中间体的制备；
- (2) 材料科学：作为交联剂参与高性能聚合物（如聚氨酯）的合成，改善材料的热稳定性和机械强度；
- (3) 化学生物学：用于蛋白质或小分子探针的修饰，通过异氰酸酯基团实现共价标记。

#### 4. 储存条件与使用建议

储存条件：建议在  $-20^{\circ}C$ 、干燥惰性气体（如氩气）保护下密封保存，避免接触湿气或强亲核试剂。开封后需立即使用或充氮保存。

使用建议：实验操作应在通风橱中进行，佩戴防化手套及护目镜；反应溶剂需严格脱水（如分子筛处理），建议以无水 THF 或二氯甲烷为反应介质。

#### 5. 质量控制与安全信息

质量控制：通过 HPLC 测定纯度>96%，核磁共振（<sup>1</sup>H/<sup>13</sup>C NMR）及质谱（MS）验证结构。

安全信息：本品对眼睛、皮肤和呼吸道有刺激性，可能引发过敏反应。UN 编号：2206（异氰酸酯类），危险类别 6.1。泄漏处理需使用惰性吸附材料，废弃时按危险化学品规范处置。急救措施包括立即冲洗接触部位，并就医观察。

（注：本说明基于现有研究数据，实际应用前请查阅最新文献并开展小试实验验证。）