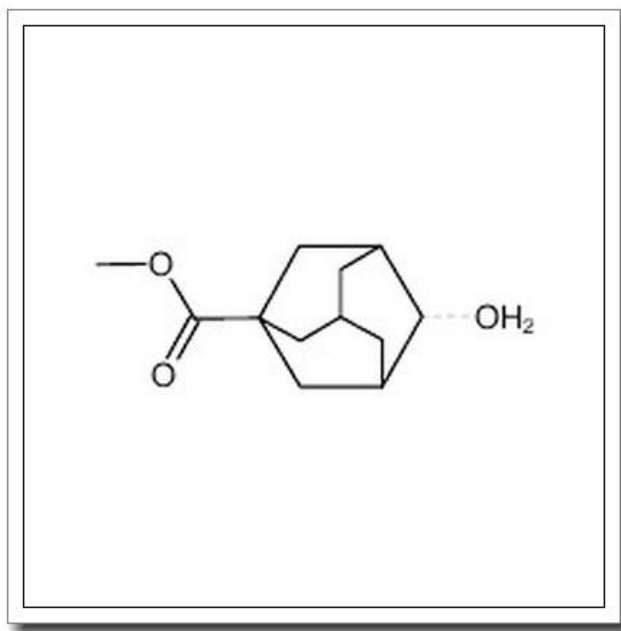


methyl 4-hydroxyadamantane-1-carboxylate

methyl 4-hydroxyadamantane-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	methyl 4-hydroxyadamantane-1-carboxylate
中文名称	methyl 4-hydroxyadamantane-1-carboxylate
CAS 号	81968-76-5
分子式	C ₁₂ H ₁₈ O ₃
分子量	210.27
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

甲基 4-羟基金刚烷-1-羧酸酯 (methyl 4-hydroxyadamantane-1-carboxylate) 是一种具有金刚烷骨架的羧酸酯类化合物，化学式为 $C_{12}H_{18}O_3$ ，分子量为 210.27，CAS 号为 81968-76-5。该化合物纯度高于 96%，常温下为白色至类白色结晶或粉末，具有较高的化学稳定性和疏水性。其结构中的羟基和酯基赋予其独特的反应活性，可作为有机合成中间体或生物活性分子的修饰基团。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物因其金刚烷结构而表现出显著的脂溶性和空间位阻效应，在药物化学中常用于增强分子的血脑屏障穿透能力或调节代谢稳定性。羟基的存在使其可通过酯化、醚化等反应进一步衍生化，广泛应用于抗病毒药物（如金刚烷胺类衍生物）和神经保护剂的研发。此外，其刚性骨架可作为分子探针或材料科学的构建单元。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药领域，本品是合成抗阿尔茨海默病药物和抗流感病毒药物的关键中间体。在材料科学中，可用于制备高耐热性聚合物或液晶材料的单体。实验室研究中，常作为模型化合物用于研究金刚烷衍生物的构效关系。具体用途包括但不限于：靶向药物载体修饰、酶抑制剂设计、以及功能性高分子材料的合成。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于干燥、避光的惰性环境中，储存温度 $2-8^{\circ}C$ 以延长稳定性。开封后需充氮保护，避免吸湿或氧化。使用时应佩戴防护手套和护目镜，在通风橱中操作。溶解性测试表明，本品易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂，难溶于水，配制溶液时需选择合适的助溶剂。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和 NMR 严格检测，确保纯度 $\geq 96\%$ ，杂质含量符合药用标准。安全数据表明，其急性毒性较低（LD50 数据待补充），但仍可能对眼睛和皮肤产生轻

微刺激。操作时需遵循 GHS 分类：避免吸入粉尘，接触后立即用大量清水冲洗。废弃物处置需符合当地环保法规，不可直接排入下水道。

（注：实际应用中需结合具体实验需求查阅最新文献或安全数据表（SDS）以获取完整信息。）