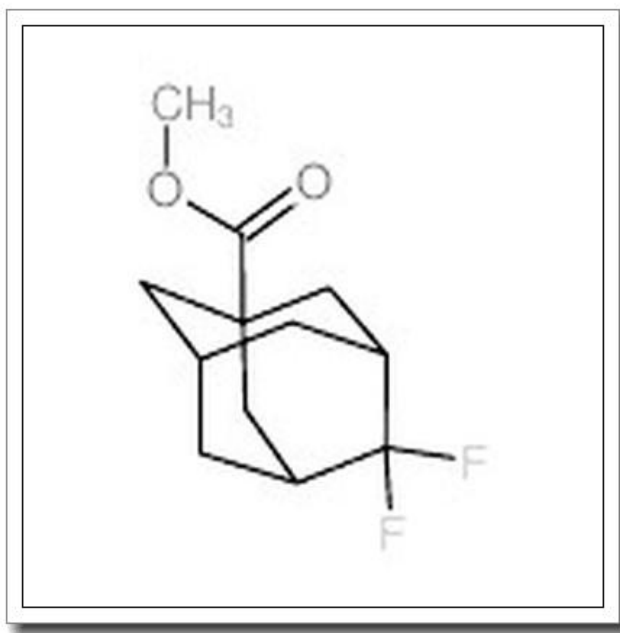


# 4,4-Difluoroadamantane-1-carboxylic acid methyl ester

*4,4-Difluoroadamantane-1-carboxylic acid methyl ester*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	4,4-Difluoroadamantane-1-carboxylic acid methyl ester
中文名称	4,4-Difluoroadamantane-1-carboxylic acid methyl ester
CAS 号	1313739-04-6
分子式	C <sub>12</sub> H <sub>16</sub> F <sub>2</sub> O <sub>2</sub>
分子量	230.251
纯度	>96%

## 产品说明

### 4, 4-二氟金刚烷-1-甲酸甲酯产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

4, 4-二氟金刚烷-1-甲酸甲酯 (CAS 号: 1313739-04-6) 是一种含氟金刚烷衍生物, 分子式为  $C_{12}H_{16}F_2O_2$ , 分子量 230. 251。该化合物以白色至类白色结晶或粉末形式存在, 纯度通常高于 96%。其结构中的二氟取代金刚烷骨架赋予其独特的立体刚性和脂溶性, 而甲酯基团则增强了其反应活性, 使其成为有机合成中的重要中间体。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为氟代金刚烷类化合物, 该产品在药物化学中具有显著价值。金刚烷结构可模拟生物膜中的脂质环境, 而氟原子的引入能调节化合物的代谢稳定性和亲脂性。其甲酯基团可通过水解转化为羧酸, 进一步衍生化为酰胺或肽类结构, 因此在蛋白酶抑制剂、抗病毒药物 (如神经氨酸酶抑制剂) 的设计中具有潜在应用。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于以下领域: 一是医药研发, 作为构建抗病毒或中枢神经系统药物的核心骨架; 二是材料科学, 用于合成含氟高分子单体, 改善材料的热稳定性和疏水性; 三是作为荧光探针或标记物的前体, 利用其刚性结构减少分子内旋转导致的荧光淬灭。具体实验中, 常用于 Suzuki 偶联、酯水解等反应。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议在  $-20^{\circ}C$  下避光保存, 长期储存需充惰性气体保护。开封后需密封防潮, 避免反复冻融。使用时应在通风橱中操作, 佩戴防护手套和护目镜。溶解性测试表明其易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂, 水溶性低, 反应体系中需控制 pH 以避免甲酯过早水解。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度 ( $>96\%$ ), 并提供 COA 分析证书。MS 和 NMR 数据可应要求提供。安全方面, 其 LD50 数据尚未完全建立, 但需避免吸入或皮肤接触。如意

外接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地有机氟化合物处置法规，禁止直接排放至环境中。

注：本说明基于现有实验数据，具体应用需结合用户实验条件优化。更多技术参数请联系技术支持。