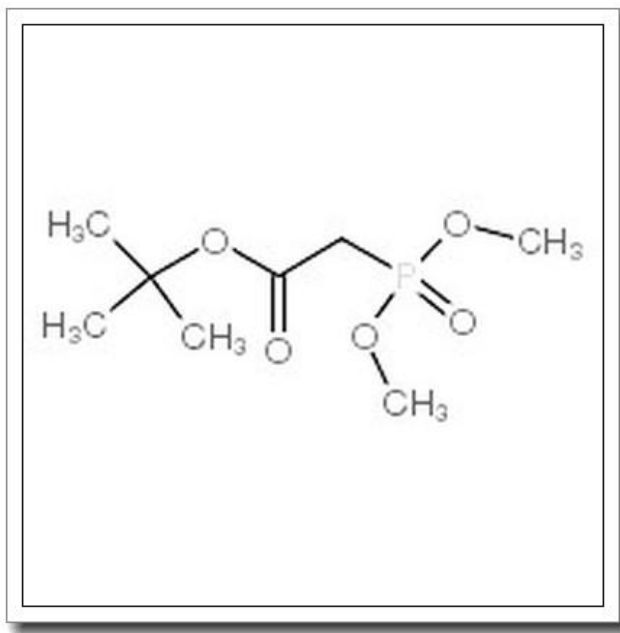


P,P-二甲基磷酰乙酸叔丁酯

tert-Butyl P, P-dimethylphosphonoacetate



产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-Butyl P, P-dimethylphosphonoacetate
中文名称	P, P-二甲基磷酰乙酸叔丁酯
CAS 号	62327-21-3
分子式	C ₈ H ₁₇ O ₅ P
分子量	224. 191
纯度	>96%

产品说明

P, P-二甲基磷酰乙酸叔丁酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

P, P-二甲基磷酰乙酸叔丁酯 (tert-Butyl P, P-dimethylphosphonoacetate) 是一种有机磷酸酯类化合物, 化学式为 $C_8H_{17}O_5P$, 分子量 224.191, CAS 号为 62327-21-3。本品为无色至淡黄色液体, 纯度 >96%, 具有典型的磷酸酯类特征结构, 其叔丁酯基团赋予其较高的化学稳定性。该化合物易溶于多数有机溶剂 (如甲醇、乙醚、二氯甲烷), 但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

作为磷酰乙酸酯衍生物, 该化合物在有机合成中表现出显著的活性, 尤其是作为重要的磷酸酯化试剂和中间体。其分子中的 P=O 键和酯基可参与多种亲核取代反应, 广泛应用于碳-磷键构建反应。在生物化学领域, 类似结构的磷酸酯类化合物常作为酶抑制剂或代谢调控剂的合成前体。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于医药和农药中间体的合成, 尤其在以下领域具有关键价值:

- 3.1 医药化学: 作为 β -氨基酸类药物的合成砌块, 用于构建抗病毒或抗肿瘤活性分子骨架。
- 3.2 有机催化: 参与 Horner-Wadsworth-Emmons 反应, 高效合成 α, β -不饱和羰基化合物。
- 3.3 材料科学: 用于功能化聚合物的改性, 提升材料的热稳定性或表面性能。

4. 储存条件与使用建议

- 4.1 储存条件: 需密封保存于干燥惰性气体 (如氮气) 环境中, 推荐温度 2-8°C, 避光防潮。
- 4.2 使用建议: 操作应在通风橱中进行, 避免直接接触皮肤或吸入蒸气。建议使用丁腈手套和护目镜。开封后建议一次性使用完毕, 或充氮保存。

5. 质量控制与安全信息

5.1 质量控制：通过 HPLC 检测纯度>96%，GC-MS 验证结构一致性，水分含量控制在 0.5%以下。

5.2 安全信息：本品对眼睛和呼吸道有刺激性，UN 编号暂未归类。泄漏处理需用惰性吸附材料（如硅藻土）覆盖，按危险废弃物处置。急救措施包括皮肤接触时用大量肥皂水冲洗，误食需立即就医。

本产品仅限科研用途，不适用于食品、药品或家庭用途。具体应用前请查阅最新版 MSDS 并开展风险评估。