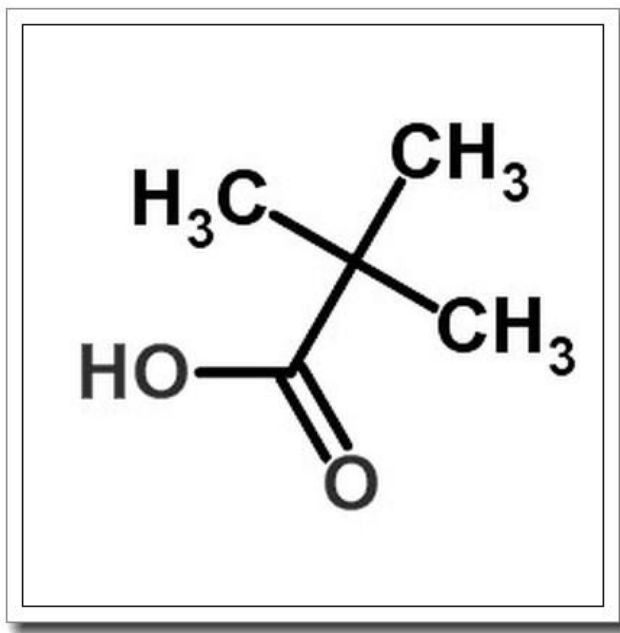


三甲基乙酸

pivalic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	pivalic acid
中文名称	三甲基乙酸
CAS 号	75-98-9
分子式	C ₅ H ₁₀ O ₂
分子量	102.132
纯度	>96%

产品说明

三甲基乙酸 (Pivalic Acid) 产品说明书

1. 产品概述与化学特性

三甲基乙酸 (化学名称: pivalic acid, CAS 号: 75-98-9) 是一种具有特殊结构的短链羧酸, 分子式为 $C_5H_{10}O_2$, 分子量为 102.132。其化学结构中包含三个甲基基团直接连接于羧基碳原子, 形成高度空间位阻的叔碳结构。该特性使其具有较低的酸解离常数 ($pK_a \approx 5.0$) 和独特的化学稳定性。本品为白色结晶固体, 纯度 $>96\%$, 易溶于有机溶剂如乙醇、乙醚, 微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

三甲基乙酸在生物化学中作为重要的合成砌块, 其叔丁基结构可显著增强衍生物的代谢稳定性。在药物化学中, 该结构能有效抵抗酶降解, 延长药物半衰期。此外, 其羧基可参与酯化、酰胺化等反应, 广泛应用于保护基团设计和前药合成。

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) 医药中间体: 用于合成抗生素 (如匹氨西林)、激素类药物及抗肿瘤化合物的侧链修饰。
- (2) 高分子材料: 作为引发剂组分参与自由基聚合反应, 改善聚合物热稳定性。
- (3) 农药合成: 制备具有抗水解特性的拟除虫菊酯类化合物。
- (4) 分析化学: 作为 HPLC 流动相添加剂或质谱分析中的挥发性离子对试剂。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于阴凉干燥处, 储存温度 $2-8^{\circ}C$, 避免与强氧化剂、碱类物质接触。开封后需充惰性气体保护以防吸潮。实验操作时应佩戴防化手套及护目镜, 于通风橱中进行称量。若需溶解, 推荐使用无水乙醇或二氯甲烷作为溶剂。

5. 质量控制与安全信息

本品通过 GC-MS 和 HPLC 双重检测, 确保纯度 $>96\%$, 水分含量 $<0.5\%$ 。安全数据表明, 其 LD_{50} (大鼠经口) 为 900 mg/kg , 属于刺激性化学品。接触皮肤可能引起红

肿，误食需立即就医。运输分类为 UN 3261 8/PG III，须符合危险化学品运输规范。废弃物处理应遵循当地环保法规，建议采用碱液中和后焚烧。

（注：本说明基于当前研究数据，具体应用需结合实验条件调整。更多技术参数可索取 COA 报告。）