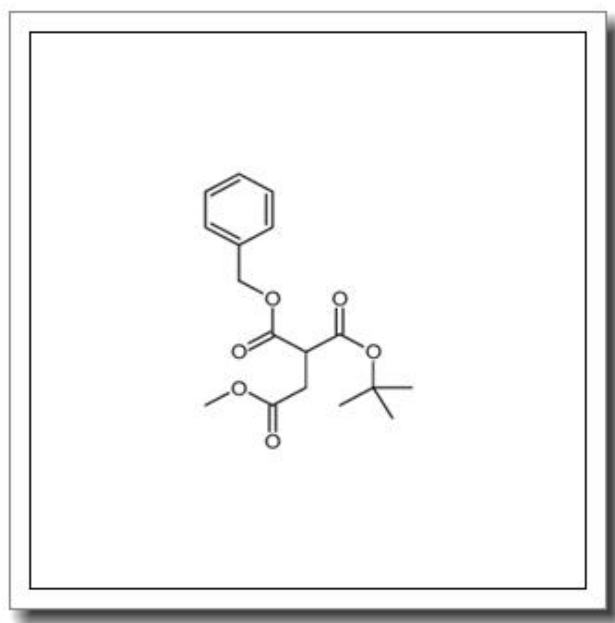


1-O-benzyl 1-O-tert-butyl 2-O-methyl ethane-1,1,2-tricarboxylate

1-O-benzyl 1-O-tert-butyl 2-O-methyl ethane-1,1,2-tricarboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-O-benzyl 1-O-tert-butyl 2-O-methyl ethane-1,1,2-tricarboxylate
中文名称	1-O-benzyl 1-O-tert-butyl 2-O-methyl ethane-1,1,2-tricarboxylate
CAS 号	1050238-07-7
分子式	C ₁₇ H ₂₂ O ₆
分子量	322.353
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

1-O-benzyl 1-O-tert-butyl 2-O-methyl ethane-1,1,2-tricarboxylate (CAS号: 1050238-07-7) 是一种多官能团羧酸酯类化合物, 分子式为 $C_{17}H_{22}O_6$, 分子量为 322.353。该化合物由苯甲基、叔丁基和甲基分别酯化乙烷-1,1,2-三羧酸而成, 结构中含有三个酯键, 赋予其良好的反应活性和选择性。其纯度 $\geq 96\%$, 外观通常为无色至淡黄色液体或低熔点固体, 具体形态可能因储存条件而异。该化合物在有机合成中表现出优异的稳定性, 适合作为中间体参与多步反应。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物在生物化学领域主要作为合成复杂有机分子的关键中间体。其多酯结构使其成为构建手性中心或保护羧酸基团的理想选择, 尤其在肽类化合物和药物活性分子的合成中具有重要价值。例如, 它可用于合成具有生物活性的天然产物或药物前体, 如抗生素或酶抑制剂。其叔丁基和苯甲基的保护基特性, 使其在固相合成和官能团选择性反应中表现出独特优势。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品广泛应用于医药研发、有机合成和材料科学领域。在医药化学中, 它常用于构建多肽类药物的骨架或作为手性合成的砌块。在有机合成中, 可用于制备羧酸衍生物或作为保护基试剂。此外, 在高分子材料领域, 其酯基结构可能参与聚合反应, 用于合成功能性聚合物。具体实验用途包括但不限于: 不对称催化反应的底物、多官能团化合物的逐步修饰以及复杂分子的片段连接。

4. 储存条件与使用建议

建议将本品密封保存于干燥、避光的低温环境中, 推荐储存温度为 $-20^{\circ}C$ 至 $4^{\circ}C$, 长期储存需充入惰性气体 (如氮气) 以降低水解风险。开封后应尽快使用, 避免反复冻融。使用前需恢复至室温并充分搅拌以确保均一性。实验操作应在通风橱中进行, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明, 该化合物易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂, 难溶于水。

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 $\geq 96\%$ 。使用时需佩戴防护手套、护目镜及实验服，避免与强氧化剂或强酸强碱接触。若发生泄漏，需用惰性吸附材料处理并妥善处置。安全数据表（SDS）显示，该化合物可能对眼睛和皮肤有刺激性，操作后需彻底清洗接触部位。废弃物应按照当地法规作为有害化学废物处理。如需进一步技术信息，请参考具体批次的分析证书或联系供应商。