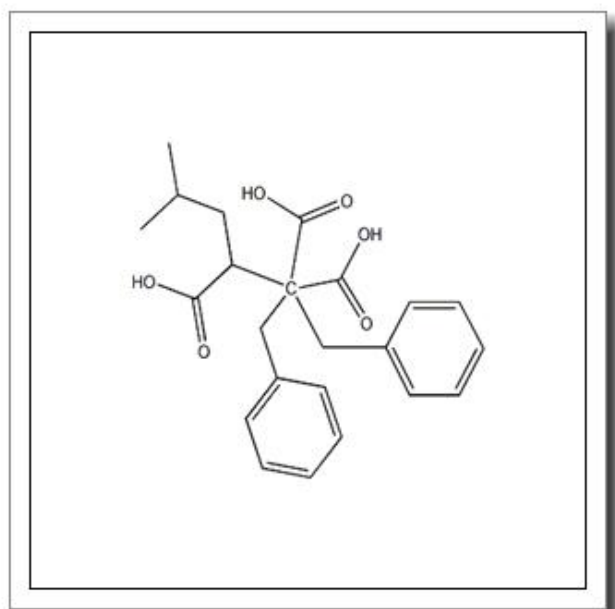


1,1,2-戊烷三羧酸,4-甲基-1,1-双(苯基甲基)酯

1,1,2-Pentanetricarboxylic acid, 4-methyl-, 1,1-bis(phenylmethyl) ester (9CI)



产品基本信息

属性	值
化学名称	1,1,2-Pentanetricarboxylic acid, 4-methyl-, 1,1-bis(phenylmethyl) ester (9CI)
中文名称	1,1,2-戊烷三羧酸,4-甲基-1,1-双(苯基甲基)酯
CAS号	165172-57-6
分子式	C ₂₃ H ₂₇ O ₆
分子量	399.45688
纯度	≥96%

产品说明

1, 1, 2-戊烷三羧酸, 4-甲基-1, 1-双(苯基甲基)酯产品说明书

产品概述与化学特性

本产品化学名称为 1,1,2-Pentanetricarboxylic acid, 4-methyl-, 1,1-bis(phenylmethyl) ester, CAS 号为 165172-57-6, 分子式为 C₂₃H₂₇O₆, 分子量为 399.45688。该化合物是一种具有特定酯化结构的有机羧酸衍生物, 纯度不低于 96%, 常温下呈白色至类白色结晶或粉末状。其分子结构中的三羧酸酯基团与苯甲基的协同作用, 使其在有机合成中表现出独特的反应活性。

生物化学功能与重要性

作为多官能团化合物, 该产品在生物化学领域主要作为中间体参与复杂有机合成反应。其分子中的酯键可被选择性水解, 而苯甲基则提供空间位阻效应, 在不对称合成中具有重要价值。该结构特征使其成为合成药物活性分子、功能材料单体的关键砌块, 尤其在构建手性中心和芳香族衍生物方面具有不可替代性。

主要应用领域与具体用途

1. 医药研发: 用于抗炎药物、酶抑制剂等活性分子的结构修饰
2. 材料科学: 作为高分子聚合物的功能化单体
3. 精细化工: 合成特种表面活性剂和离子螯合剂
4. 科研领域: 有机合成方法学研究中作为模型化合物

储存条件与使用建议

本品应避光保存于 2-8°C 干燥环境中, 开封后需充惰性气体保护。使用前建议进行氮气置换处理, 避免长时间暴露于潮湿空气。溶解性测试表明, 其在 DMF、DMSO 等极性非质子溶剂中具有良好溶解性, 建议反应体系含水量控制在 0.1% 以下以获得最佳反应收率。

质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 ≥ 96%, 重金属含量 < 10ppm。安全数据表明其属于刺激性化学品, 操作时需佩戴防护眼镜和丁腈手套, 避免吸入粉尘。如接触皮肤应立即用大

量清水冲洗，眼部接触需用生理盐水冲洗 15 分钟并就医。废弃物处理应遵循当地危险化学品处置法规。

（注：本说明基于当前研究数据编制，具体应用需根据实验条件优化。更多技术参数可索取 COA 报告。）