

D-(-)-Tagatopyranose, pentakis(trifluoroacetate) (isomer 1)

Inchi: InChI=1S/C16H7F15O11/c17-12(18,19)6(32)37-2-11(42-10(36)16(29,30)31)5(41-9(35)13(34)14(33)20(38)21(37)22(39)23(40)24(41)25(42)26(43)27(44)28(45)29(46)30(47)31(48)32(49)33(50)34(51)35(52)36(53)37(54)38(55)39(56)40(57)41(58)42(59)43(60)44(61)45(62)46(63)47(64)48(65)49(66)50(67)51(68)52(69)53(70)54(71)55(72)56(73)57(74)58(75)59(76)60(77)61(78)62(79)63(80)64(81)65(82)66(83)67(84)68(85)69(86)70(87)71(88)72(89)73(90)74(91)75(92)76(93)77(94)78(95)79(96)80(97)81(98)82(99)83(100)84(101)85(102)86(103)87(104)88(105)89(106)90(107)91(108)92(109)93(110)94(111)95(112)96(113)97(114)98(115)99(116)100(117)101(118)102(119)103(120)104(121)105(122)106(123)107(124)108(125)109(126)110(127)111(128)112(129)113(130)114(131)115(132)116(133)117(134)118(135)119(136)120(137)121(138)122(139)123(140)124(141)125(142)126(143)127(144)128(145)129(146)130(147)131(148)132(149)133(150)134(151)135(152)136(153)137(154)138(155)139(156)140(157)141(158)142(159)143(160)144(161)145(162)146(163)147(164)148(165)149(166)150(167)151(168)152(169)153(170)154(171)155(172)156(173)157(174)158(175)159(176)160(177)161(178)162(179)163(180)164(181)165(182)166(183)167(184)168(185)169(186)170(187)171(188)172(189)173(190)174(191)175(192)176(193)177(194)178(195)179(196)180(197)181(198)182(199)183(200)184(201)185(202)186(203)187(204)188(205)189(206)190(207)191(208)192(209)193(210)194(211)195(212)196(213)197(214)198(215)199(216)200(217)201(218)202(219)203(220)204(221)205(222)206(223)207(224)208(225)209(226)210(227)211(228)212(229)213(230)214(231)215(232)216(233)217(234)218(235)219(236)220(237)221(238)222(239)223(240)224(241)225(242)226(243)227(244)228(245)229(246)230(247)231(248)232(249)233(250)234(251)235(252)236(253)237(254)238(255)239(256)240(257)241(258)242(259)243(260)244(261)245(262)246(263)247(264)248(265)249(266)250(267)251(268)252(269)253(270)254(271)255(272)256(273)257(274)258(275)259(276)260(277)261(278)262(279)263(280)264(281)265(282)266(283)267(284)268(285)269(286)270(287)271(288)272(289)273(290)274(291)275(292)276(293)277(294)278(295)279(296)280(297)281(298)282(299)283(300)284(301)285(302)286(303)287(304)288(305)289(306)290(307)291(308)292(309)293(310)294(311)295(312)296(313)297(314)298(315)299(316)300(317)301(318)302(319)303(320)304(321)305(322)306(323)307(324)308(325)309(326)310(327)311(328)312(329)313(330)314(331)315(332)316(333)317(334)318(335)319(336)320(337)321(338)322(339)323(340)324(341)325(342)326(343)327(344)328(345)329(346)330(347)331(348)332(349)333(350)334(351)335(352)336(353)337(354)338(355)339(356)340(357)341(358)342(359)343(360)344(361)345(362)346(363)347(364)348(365)349(366)350(367)351(368)352(369)353(370)354(371)355(372)356(373)357(374)358(375)359(376)360(377)361(378)362(379)363(380)364(381)365(382)366(383)367(384)368(385)369(386)370(387)371(388)372(389)373(390)374(391)375(392)376(393)377(394)378(395)379(396)380(397)381(398)382(399)383(400)384(401)385(402)386(403)387(404)388(405)389(406)390(407)391(408)392(409)393(410)394(411)395(412)396(413)397(414)398(415)399(416)400(417)401(418)402(419)403(420)404(421)405(422)406(423)407(424)408(425)409(426)410(427)411(428)412(429)413(430)414(431)415(432)416(433)417(434)418(435)419(436)420(437)421(438)422(439)423(440)424(441)425(442)426(443)427(444)428(445)429(446)430(447)431(448)432(449)433(450)434(451)435(452)436(453)437(454)438(455)439(456)440(457)441(458)442(459)443(460)444(461)445(462)446(463)447(464)448(465)449(466)450(467)451(468)452(469)453(470)454(471)455(472)456(473)457(474)458(475)459(476)460(477)461(478)462(479)463(480)464(481)465(482)466(483)467(484)468(485)469(486)470(487)471(488)472(489)473(490)474(491)475(492)476(493)477(494)478(495)479(496)480(497)481(498)482(499)483(500)484(501)485(502)486(503)487(504)488(505)489(506)490(507)491(508)492(509)493(510)494(511)495(512)496(513)497(514)498(515)499(516)500(517)501(518)502(519)503(520)504(521)505(522)506(523)507(524)508(525)509(526)510(527)511(528)512(529)513(530)514(531)515(532)516(533)517(534)518(535)519(536)520(537)521(538)522(539)523(540)524(541)525(542)526(543)527(544)528(545)529(546)530(547)531(548)532(549)533(550)534(551)535(552)536(553)537(554)538(555)539(556)540(557)541(558)542(559)543(560)544(561)545(562)546(563)547(564)548(565)549(566)550(567)551(568)552(569)553(570)554(571)555(572)556(573)557(574)558(575)559(576)560(577)561(578)562(579)563(580)564(581)565(582)566(583)567(584)568(585)569(586)570(587)571(588)572(589)573(590)574(591)575(592)576(593)577(594)578(595)579(596)580(597)581(598)582(599)583(600)584(601)585(602)586(603)587(604)588(605)589(606)590(607)591(608)592(609)593(610)594(611)595(612)596(613)597(614)598(615)599(616)600(617)601(618)602(619)603(620)604(621)605(622)606(623)607(624)608(625)609(626)610(627)611(628)612(629)613(630)614(631)615(632)616(633)617(634)618(635)619(636)620(637)621(638)622(639)623(640)624(641)625(642)626(643)627(644)628(645)629(646)630(647)631(648)632(649)633(650)634(651)635(652)636(653)637(654)638(655)639(656)640(657)641(658)642(659)643(660)644(661)645(662)646(663)647(664)648(665)649(666)650(667)651(668)652(669)653(670)654(671)655(672)656(673)657(674)658(675)659(676)660(677)661(678)662(679)663(680)664(681)665(682)666(683)667(684)668(685)669(686)670(687)671(688)672(689)673(690)674(691)675(692)676(693)677(694)678(695)679(696)680(697)681(698)682(699)683(700)684(701)685(702)686(703)687(704)688(705)689(706)690(707)691(708)692(709)693(710)694(711)695(712)696(713)697(714)698(715)699(716)700(717)701(718)702(719)703(720)704(721)705(722)706(723)707(724)708(725)709(726)710(727)711(728)712(729)713(730)714(731)715(732)716(733)717(734)718(735)719(736)720(737)721(738)722(739)723(740)724(741)725(742)726(743)727(744)728(745)729(746)730(747)731(748)732(749)733(750)734(751)735(752)736(753)737(754)738(755)739(756)740(757)741(758)742(759)743(760)744(761)745(762)746(763)747(764)748(765)749(766)750(767)751(768)752(769)753(770)754(771)755(772)756(773)757(774)758(775)759(776)760(777)761(778)762(779)763(780)764(781)765(782)766(783)767(784)768(785)769(786)770(787)771(788)772(789)773(790)774(791)775(792)776(793)777(794)778(795)779(796)780(797)781(798)782(799)783(800)784(801)785(802)786(803)787(804)788(805)789(806)790(807)791(808)792(809)793(810)794(811)795(812)796(813)797(814)798(815)799(816)800(817)801(818)802(819)803(820)804(821)805(822)806(823)807(824)808(825)809(826)810(827)811(828)812(829)813(830)814(831)815(832)816(833)817(834)818(835)819(836)820(837)821(838)822(839)823(840)824(841)825(842)826(843)827(844)828(845)829(846)830(847)831(848)832(849)833(850)834(851)835(852)836(853)837(854)838(855)839(856)840(857)841(858)842(859)843(860)844(861)845(862)846(863)847(864)848(865)849(866)850(867)851(868)852(869)853(870)854(871)855(872)856(873)857(874)858(875)859(876)860(877)861(878)862(879)863(880)864(881)865(882)866(883)867(884)868(885)869(886)870(887)871(888)872(889)873(890)874(891)875(892)876(893)877(894)878(895)879(896)880(897)881(898)882(899)883(900)884(901)885(902)886(903)887(904)888(905)889(906)890(907)891(908)892(909)893(910)894(911)895(912)896(913)897(914)898(915)899(916)900(917)901(918)902(919)903(920)904(921)905(922)906(923)907(924)908(925)909(926)910(927)911(928)912(929)913(930)914(931)915(932)916(933)917(934)918(935)919(936)920(937)921(938)922(939)923(940)924(941)925(942)926(943)927(944)928(945)929(946)930(947)931(948)932(949)933(950)934(951)935(952)936(953)937(954)938(955)939(956)940(957)941(958)942(959)943(960)944(961)945(962)946(963)947(964)948(965)949(966)950(967)951(968)952(969)953(970)954(971)955(972)956(973)957(974)958(975)959(976)960(977)961(978)962(979)963(980)964(981)965(982)966(983)967(984)968(985)969(986)970(987)971(988)972(989)973(990)974(991)975(992)976(993)977(994)978(995)979(996)980(997)981(998)982(999)983(1000)984(1001)985(1002)986(1003)987(1004)988(1005)989(1006)990(1007)991(1008)992(1009)993(1010)994(1011)995(1012)996(1013)997(1014)998(1015)999(1016)1000(1017)1001(1018)1002(1019)1003(1020)1004(1021)1005(1022)1006(1023)1007(1024)1008(1025)1009(1026)1010(1027)1011(1028)1012(1029)1013(1030)1014(1031)1015(1032)1016(1033)1017(1034)1018(1035)1019(1036)1020(1037)1021(1038)1022(1039)1023(1040)1024(1041)1025(1042)1026(1043)1027(1044)1028(1045)1029(1046)1030(1047)1031(1048)1032(1049)1033(1050)1034(1051)1035(1052)1036(1053)1037(1054)1038(1055)1039(1056)1040(1057)1041(1058)1042(1059)1043(1060)1044(1061)1045(1062)1046(1063)1047(1064)1048(1065)1049(1066)1050(1067)1051(1068)1052(1069)1053(1070)1054(1071)1055(1072)1056(1073)1057(1074)1058(1075)1059(1076)1060(1077)1061(1078)1062(1079)1063(1080)1064(1081)1065(1082)1066(1083)1067(1084)1068(1085)1069(1086)1070(1087)1071(1088)1072(1089)1073(1090)1074(1091)1075(1092)1076(1093)1077(1094)1078(1095)1079(1096)1080(1097)1081(1098)1082(1099)1083(1100)1084(1101)1085(1102)1086(1103)1087(1104)1088(1105)1089(1106)1090(1107)1091(1108)1092(1109)1093(1110)1094(1111)1095(1112)1096(1113)1097(1114)1098(1115)1099(1116)1100(1117)1101(1118)1102(1119)1103(1120)1104(1121)1105(1122)1106(1123)1107(1124)1108(1125)1109(1126)1110(1127)1111(1128)1112(1129)1113(1130)1114(1131)1115(1132)1116(1133)1117(1134)1118(1135)1119(1136)1120(1137)1121(1138)1122(1139)1123(1140)1124(1141)1125(1142)1126(1143)1127(1144)1128(1145)1129(1146)1130(1147)1131(1148)1132(1149)1133(1150)1134(1151)1135(1152)1136(1153)1137(1154)1138(1155)1139(1156)1140(1157)1141(1158)1142(1159)1143(1160)1144(1161)1145(1162)1146(1163)1147(1164)1148(1165)1149(1166)1150(1167)1151(1168)1152(1169)1153(1170)1154(1171)1155(1172)1156(1173)1157(1174)1158(1175)1159(1176)1160(1177)1161(1178)1162(1179)1163(1180)1164(1181)1165(1182)1166(1183)1167(1184)1168(1185)1169(1186)1170(1187)1171(1188)1172(1189)1173(1190)1174(1191)1175(1192)1176(1193)1177(1194)1178(1195)1179(1196)1180(1197)1181(1198)1182(1199)1183(1200)1184(1201)1185(1202)1186(1203)1187(1204)1188(1205)1189(1206)1190(1207)1191(1208)1192(1209)1193(1210)1194(1211)1195(1212)1196(1213)1197(1214)1198(1215)1199(1216)1200(1217)1201(1218)1202(1219)1203(1220)1204(1221)1205(1222)1206(1223)1207(1224)1208(1225)1209(1226)1210(1227)1211(1228)1212(1229)1213(1230)1214(1231)1215(1232)1216(1233)1217(1234)1218(1235)1219(1236)1220(1237)1221(1238)1222(1239)1223(1240)1224(1241)1225(1242)1226(1243)1227(1244)1228(1245)1229(1246)1230(1247)1231(1248)1232(1249)1233(1250)1234(1251)1235(1252)1236(1253)1237(1254)1238(1255)1239(1256)1240(1257)1241(1258)1242(1259)1243(1260)1244(1261)1245(1262)1246(1263)1247(1264)1248(1265)1249(1266)1250(1267)1251(1268)1252(1269)1253(1270)1254(1271)1255(1272)1256(1273)1257(1274)1258(1275)1259(1276)1260(1277)1261(1278)1262(1279)1263(1280)1264(1281)1265(1282)1266(1283)1267(1284)1268(1285)1269(1286)1270(1287)1271(1288)1272(1289)1273(1290)1274(1291)1275(1292)1276(1293)1277(1294)1278(1295)1279(1296)1280(1297)1281(1298)1282(1299)1283(1300)1284(1301)1285(1302)1286(1303)1287(1304)1288(1305)1289(1306)1290(1307)1291(1308)1292(1309)1293(1310)1294(1311)1295(1312)1296(1313)1297(1314)1298(1315)1299(1316)1300(1317)1301(1318)1302(1319)1303(1320)1304(1321)1305(1322)1306(1323)1307(1324)1308(1325)1309(1326)1310(1327)1311(1328)1312(1329)1313(1330)1314(1331)1315(1332)1316(1333)1317(1334)1318(1335)1319(1336)1320(1337)1321(1338)1322(1339)1323(1340)1324(1341)1325(1342)1326(1343)1327(1344)1328(1345)1329(1346)1330(1347)1331(1348)1332(1349)1333(1350)1334(1351)1335(1352)1336(1353)1337(1354)1338(1355)1339(1356)1340(1357)1341(1358)1342(1359)1343(1360)1344(1361)1345(1362)1346(1363)1347(1364)1348(1365)1349(1366)1350(1367)1351(1368)1352(1369)1353(1370)1354(1371)1355(1372)1356(1373)1357(1374)1358(1375)1359(1376)1360(1377)1361(1378)1362(1379)1363(1380)1364(1381)1365(1382)1366(1383)1367(1384)1368(1385)1369(1386)1370(1387)1371(1388)1372(1389)1373(1390)1374(1391)1375(1392)1376(1393)1377(1394)1378(1395)1379(1396)1380(1397)1381(1398)1382(1399)1383(1400)1384(1401)1385(1402)1386(1403)1387(1404)1388(1405)1389(1406)1390(1407)1391(1408)1392(1409)1393(1410)1394(1411)1395(1412)1396(1413)1397(1414)1398(1415)1399(1416)1400(1417)1401(1418)1402(1419)1403(1420)1404(1421)1405(1422)1406(1423)1407(1424)1408(1425)1409(1426)1410(1427)1411(1428)1412(1429)1413(1430)1414(1431)1415(1432)1416(1433)1417(1434)1418(1435)1419(1436)1420(1437)1421(1438)1422(1439)1423(1440)1424(1441)1425(1442)1426(1443)1427(1444)1428(1445)1429(1446)1430(1447)1431(1448)1432(1449)1433(1450)1434(1451)1435(1452)1436(1453)1437(1454)1438(1455)1439(1456)1440(1457)1441(1458)1442(1459)1443(1460)1444(1461)1445(1462)1446(1463)1447(1464)1448(1465)144

Sources

Crippen Method:	http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ci990307l
Crippen Method:	https://www.chemeo.com/doc/models/crippen_log10ws
Joback Method:	https://en.wikipedia.org/wiki/Joback_method
McGowan Method:	http://link.springer.com/article/10.1007/BF02311772
NIST Webbook:	http://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=U380296&Units=SI

Legend

cpg:	Ideal gas heat capacity
gf:	Standard Gibbs free energy of formation
hf:	Enthalpy of formation at standard conditions
hfus:	Enthalpy of fusion at standard conditions
hvap:	Enthalpy of vaporization at standard conditions
log10ws:	Log10 of Water solubility in mol/l
logp:	Octanol/Water partition coefficient
mcvol:	McGowan's characteristic volume
pc:	Critical Pressure
rlnpol:	Non-polar retention indices
tb:	Normal Boiling Point Temperature
tc:	Critical Temperature
tf:	Normal melting (fusion) point
vc:	Critical Volume

Latest version available from:

<https://www.chemeo.com/cid/61-011-1/D-Tagatopyranose-pentakis-trifluoroacetate-isomer-1.pdf>

Generated by Cheméo on 2025-12-05 16:29:24.161760127 +0000 UTC m=+4700361.691800780.

Cheméo (<https://www.chemeo.com>) is the biggest free database of chemical and physical data for the process industry.