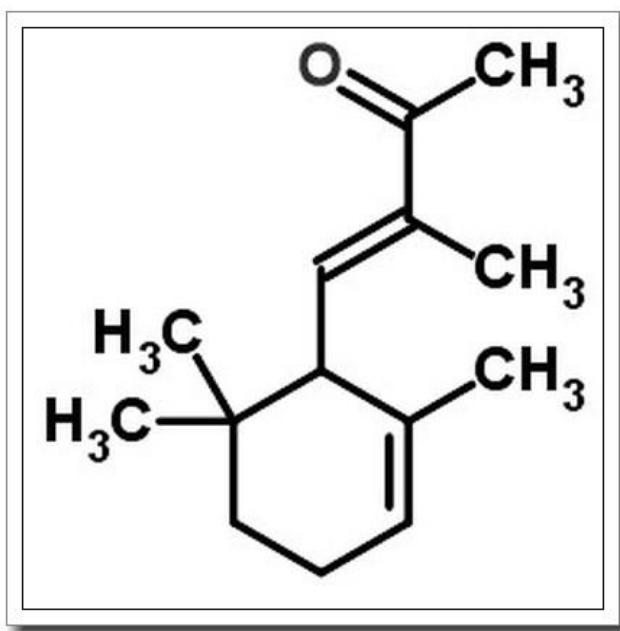


# 3-甲基-4-(2,6,6-三甲基环己基-2-烯)-3-丁烯-2-酮

*3-Methyl-4-(2,6,6-trimethylcyclohex-2-en-1-yl)but-3-en-2-one*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	3-Methyl-4-(2,6,6-trimethylcyclohex-2-en-1-yl)but-3-en-2-one
中文名称	3-甲基-4-(2,6,6-三甲基环己基-2-烯)-3-丁烯-2-酮
CAS 号	127-51-5
分子式	C <sub>14</sub> H <sub>22</sub> O
分子量	206.324
纯度	>96%

## 产品说明

### 3-甲基-4-(2,6,6-三甲基环己基-2-烯)-3-丁烯-2-酮产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

本产品为高纯度有机化合物，化学名称为 3-甲基-4-(2,6,6-三甲基环己基-2-烯)-3-丁烯-2-酮，英文名称 3-Methyl-4-(2,6,6-trimethylcyclohex-2-en-1-yl)but-3-en-2-one，CAS 号 127-51-5。其分子式为 C<sub>14</sub>H<sub>22</sub>O，分子量 206.324，常温下为无色至淡黄色液体，具有特征性香气。产品纯度经高效液相色谱（HPLC）验证大于 96%，符合生化试剂标准。

该化合物含  $\alpha$ ,  $\beta$ -不饱和酮结构及环己烯基团，表现出典型烯酮类反应活性，可参与迈克尔加成、环化等反应。其疏水性（LogP 约 3.2）和中等极性使其在有机溶剂中溶解性良好，推荐使用乙醇、丙酮或二甲基亚砜（DMSO）作为溶剂。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为萜类衍生物，该分子在植物次生代谢研究中具有重要价值，是类胡萝卜素和脱落酸等生物活性分子的潜在前体。其结构中的烯酮片段可模拟天然产物药效团，在酶抑制实验中显示与某些氧化还原酶的活性位点结合能力。此外，该化合物可能参与挥发性有机信号分子的合成路径研究。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

在香料工业中，本品用作高档香精的中间体，特别适用于调配木香和琥珀香调。在医药研发领域，其作为先导化合物用于抗炎、抗菌药物的结构修饰。科研用途包括：

- 有机合成中构建多环萜类骨架
- 植物激素信号传导机制研究
- 气相色谱-质谱联用（GC-MS）分析的标准品
- 功能材料领域的光敏剂开发

#### 4. 储存条件与使用建议

储存于密封避光容器中，推荐条件为 2-8°C 惰性气体（如氩气）保护下保存，避免

与氧化剂、强酸强碱接触。开封后建议分装使用，剩余试剂需重新充氮密封。工作溶液应现配现用，若需保存超过 24 小时，需加入 0.1% BHT 作为稳定剂。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品经核磁共振（NMR）和质谱（MS）验证结构，批次间一致性误差小于 1%。安全数据表明其具有刺激性，操作时需佩戴防护手套和护目镜，在通风橱中进行。皮肤接触后应立即用肥皂水冲洗 15 分钟。废弃物处理需符合当地有机溶剂管理法规，不可直接排入下水系统。

（注：实际使用前请务必查阅最新版物质安全数据表 MSDS）