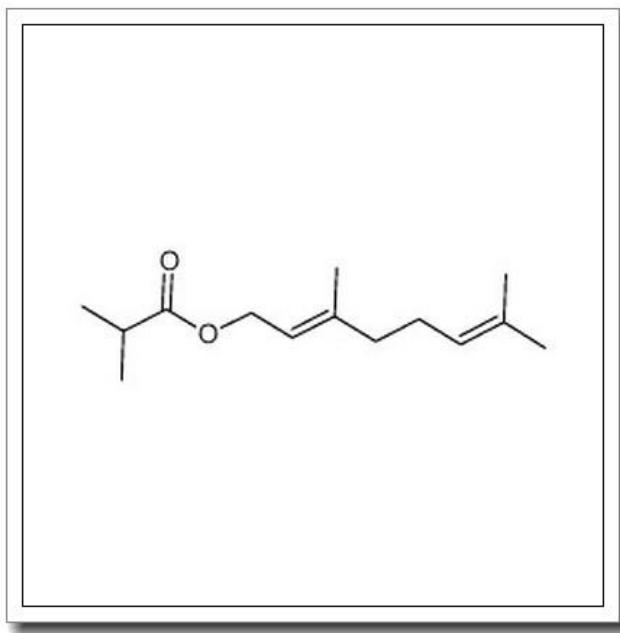


异丁酸香叶酯

geranyl isobutyrate



产品基本信息

属性	值
化学名称	geranyl isobutyrate
中文名称	异丁酸香叶酯
CAS 号	2345-26-8
分子式	C ₁₄ H ₂₄ O ₂
分子量	224.339
纯度	>96%

产品说明

异丁酸香叶酯产品说明书

产品概述与化学特性

异丁酸香叶酯 (geranyl isobutyrate, CAS 号 2345-26-8) 是一种单萜类酯化合物, 分子式为 $C_{14}H_{24}O_2$, 分子量 224.339。本品为无色至淡黄色透明液体, 具有特征性的花果香气, 密度约为 0.89 g/cm^3 , 沸点 $242-244^\circ \text{C}$ 。其化学结构由香叶醇与异丁酸酯化形成, 纯度经 GC 分析确认 $\geq 96\%$, 主要杂质为未反应前体及同分异构体。

生物化学功能与重要性

该化合物是植物次生代谢产物, 天然存在于柑橘、薰衣草等植物精油中。作为挥发性香气成分, 在植物防御系统和传粉生态中起重要作用。其酯键结构赋予分子良好的脂溶性和稳定性, 能够通过细胞膜与嗅觉受体结合, 在 10^{-9} M 浓度下即可被感知。在哺乳动物系统中可被酯酶水解为香叶醇和异丁酸。

主要应用领域与具体用途

1. 香料工业: 作为定香剂用于高档香水、化妆品香精配方, 特别适用于玫瑰、柑橘香型
2. 食品添加剂: GB2760 批准使用的食用香料 (FEMA 编号 2513), 用于软饮、糖果的果味增强
3. 生物研究: 作为昆虫信息素组分用于行为学研究
4. 医药中间体: 用于合成维生素 E 类似物及萜类衍生物

储存条件与使用建议

储存于密封棕色玻璃瓶中, 充氮保护, -20°C 避光保存。开启后建议在干燥环境下分装使用, 避免反复冻融。工作溶液建议用无水乙醇或 DMSO 配制, 浓度不超过 10 mM 。与强氧化剂、强酸强碱分开存放。

质量控制与安全信息

批次纯度通过 GC-FID 检测, 水分含量 $\leq 0.5\%$ (Karl Fischer 法)。急性毒性数

据: 大鼠经口 LD₅₀ > 5000 mg/kg (OECD 402)。操作时需佩戴护目镜和丁腈手套, 通风橱中使用。若接触皮肤, 立即用肥皂水冲洗 15 分钟。废弃物按有机溶剂类别处置, 符合《国家危险废物名录》HW06 类要求。