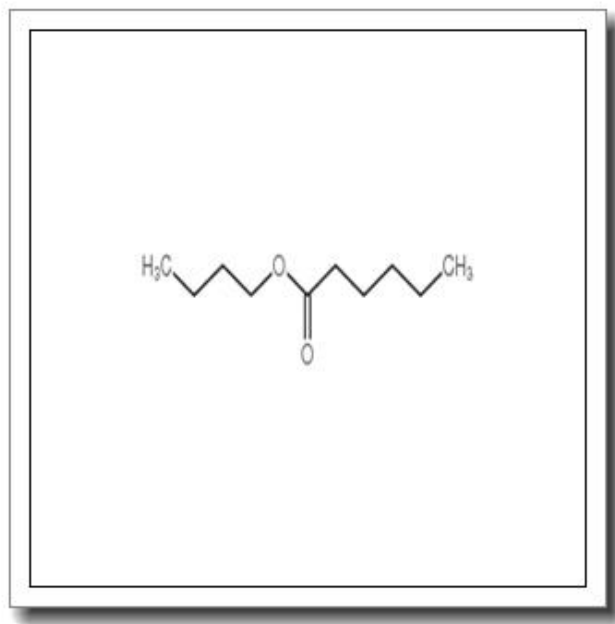


己酸丁酯

Butyl Hexanoate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Butyl Hexanoate
中文名称	己酸丁酯
CAS 号	626-82-4
分子式	C ₁₀ H ₂₀ O ₂
分子量	172.265
纯度	≥ 96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

己酸丁酯 (Butyl Hexanoate) 是一种有机酯类化合物, 化学式为 $C_{10}H_{20}O_2$, 分子量为 172.265, CAS 号为 626-82-4。其纯度通常 $\geq 96\%$, 具有典型的酯类香气, 呈现无色至淡黄色液体形态。该化合物密度约为 0.87 g/cm^3 , 沸点范围为 $185-190^\circ \text{C}$, 微溶于水, 易溶于乙醇、乙醚等有机溶剂。其结构中的酯键赋予其良好的挥发性与反应活性, 是食品、香料和化工领域的重要中间体。

2. 生物化学功能与重要性

己酸丁酯在生物化学中作为风味物质前体, 可通过酯化反应调控香气释放。其水解产物己酸和丁醇均为天然代谢中间体, 在微生物发酵和酶催化反应中具有重要作用。该化合物在植物挥发性有机物 (VOCs) 中亦有发现, 参与昆虫引诱等生态过程, 因此在农业和生态研究中具有特殊价值。

3. 主要应用领域与具体用途

在食品工业中, 己酸丁酯作为食用香料 (GB 2760 允许添加), 广泛用于菠萝、苹果等水果香精的调配。日化领域用于洗发水、肥皂的香基成分, 提供清新果香。医药行业将其作为溶剂或药物包衣材料, 同时在高分子材料合成中可作为增塑剂或反应单体。此外, 在科研中常用于气相色谱标准品或有机合成实验。

4. 储存条件与使用建议

需密封保存于阴凉通风处, 推荐温度范围为 $2-8^\circ \text{C}$, 避免光照与氧化。开封后建议充氮保护以延长稳定性。使用时应佩戴丁腈手套与护目镜, 于通风橱中操作。运输中须分类为 3 类易燃液体, UN 编号 1993。与强氧化剂、酸碱类物质分储分运。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 GC-MS 验证纯度, 水分含量 $\leq 0.1\%$, 酸值 $\leq 1.0 \text{ mg KOH/g}$ 。安全数据表 (SDS) 显示其 LD_{50} (大鼠经口) 为 $>5000 \text{ mg/kg}$, 属低毒类, 但高浓度蒸气可能引发呼吸道刺激。泄漏处理需用砂土吸附后焚烧, 废水排放需符合 GB 8978-1996 标准。储存容器建议选用聚乙烯或玻璃材质, 避免长期接触金属铜。