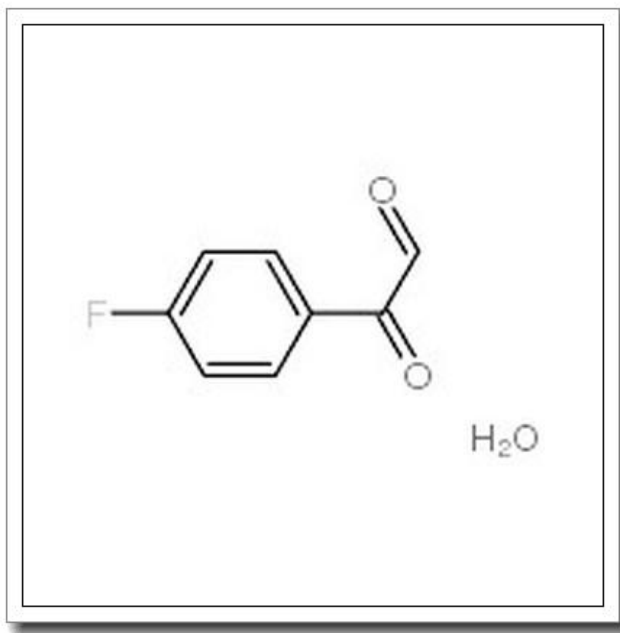


4-氟苯甲酰甲醛水合物

2-(4-fluorophenyl)-2-oxoacetaldehyde, hydrate



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-(4-fluorophenyl)-2-oxoacetaldehyde, hydrate
中文名称	4-氟苯甲酰甲醛水合物
CAS 号	447-43-8
分子式	C ₈ H ₇ F ₀₃
分子量	170.138
纯度	>96%

产品说明

4-氟苯甲酰甲醛水合物产品说明书

1. 产品概述与化学特性

4-氟苯甲酰甲醛水合物（化学名称：2-(4-fluorophenyl)-2-oxoacetaldehyde, hydrate）是一种含氟芳香族化合物，CAS 号为 447-43-8，分子式 C₈H₇F₃O₃，分子量 170.138。本品为白色至类白色结晶性粉末，纯度>96%，具有典型的醛基和酮基反应活性，易溶于极性有机溶剂（如甲醇、乙醇），微溶于水。其结构中的氟原子和羰基赋予其独特的电子效应，使其成为有机合成和药物化学中的重要中间体。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物因其苯环对位氟取代基和活泼的 α-酮醛结构，在生物化学中表现出显著的亲电性和反应多样性。其醛基可与氨基或巯基发生缩合反应，适用于蛋白质交联或小分子修饰研究。此外，氟原子的引入可增强化合物的代谢稳定性和脂溶性，在药物设计中被广泛用于优化先导化合物的药代动力学性质。

3. 主要应用领域与具体用途

4-氟苯甲酰甲醛水合物主要用于以下领域：

- 医药中间体：合成含氟喹诺酮类抗生素或抗肿瘤药物的关键砌块。
- 材料科学：作为功能化高分子材料的交联剂或改性剂。
- 生化研究：用于荧光探针或酶抑制剂的制备，通过醛基与生物大分子特异性结合。
- 农业化学：参与含氟农药的合成，提高化合物的生物活性。

4. 储存条件与使用建议

本品需避光密封保存于干燥环境中，推荐储存温度为 2-8° C，长期存放建议充氮保护。使用时需在通风橱中操作，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解建议选用无水乙醇或 DMF，配制后溶液需现配现用，以防醛基氧化或水合结构分解。

5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC 检测纯度>96%，残留溶剂符合 USP 标准。安全数据表明，其具有刺激

性，可能引起眼睛和皮肤灼伤（GHS 分类：H314）。操作时应佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩，若不慎接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置需符合当地化学品管理法规，禁止直接排入环境。

（注：本说明基于现有研究数据，具体应用需结合实验条件进一步验证。）