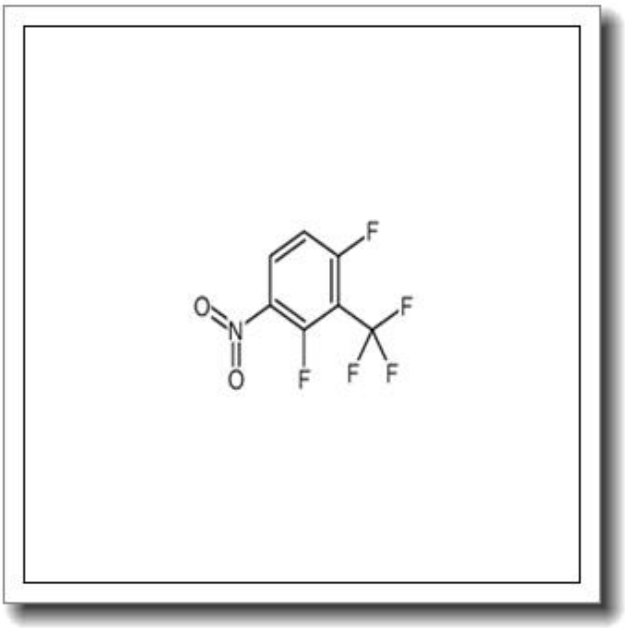
1,3-二氟-4-硝基-2-三氟甲苯

1,3-Difluoro-4-nitro-2-(trifluoromethyl)benzene



产品基本信息

属性	值
化学名称	1,3-Difluoro-4-nitro-2-(trifluoromethyl)benzene
中文名称	1,3-二氟-4-硝基-2-三氟甲苯
CAS 号	123973-36-4
分子式	C7H2F5NO2
分子量	227.088
纯度	≧96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

1,3-二氟-4-硝基-2-三氟甲苯（CAS 号：123973-36-4）是一种含氟芳香族化合物，分子式为 C7H2F5NO2，分子量为 227.088。该化合物以高纯度（≥96%）提供，具有显著的电子效应和空间位阻特性，其结构中的硝基和三氟甲基使其在亲电取代反应中表现出高反应活性。常温下为白色至淡黄色结晶或粉末，易溶于有机溶剂如二氯甲烷、乙醚和丙酮，微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物在有机合成中作为关键中间体，尤其适用于构建含氟药物分子或功能材料。其硝基可通过还原反应转化为氨基，进一步衍生化；而三氟甲基和氟原子的引入可显著改善化合物的脂溶性、代谢稳定性和生物活性，因此在药物化学和农药研发中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

- 医药领域：用于合成含氟抗肿瘤、抗病毒或中枢神经系统药物，如蛋白酶抑制剂或激酶抑制剂。
- 农药研发：作为杀虫剂或除草剂的中间体，增强化合物的靶向性和环境稳定性。
- 材料科学：参与制备含氟液晶、高分子单体或电子材料，改善材料的热稳定性和介电性能。

4. 储存条件与使用建议

- 储存于密闭容器中，避光、防潮，建议温度 2-8° C，长期保存需充惰性气体保护。
- 使用时需在通风橱中操作，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解建议使用干燥的极性有机溶剂，并避免与强还原剂或强碱共存。

5. 质量控制与安全信息

- 质量控制：通过 HPLC 检测纯度（≥96%），并符合核磁共振（NMR）和质谱（MS）的标准谱图。

- 安全信息：该化合物对眼睛、皮肤和呼吸道有刺激性，操作时需佩戴防护手套、护目镜和防尘口罩。若接触皮肤，立即用大量清水冲洗。废弃物需按危险化学品规范处置。

（全文共 436 字）