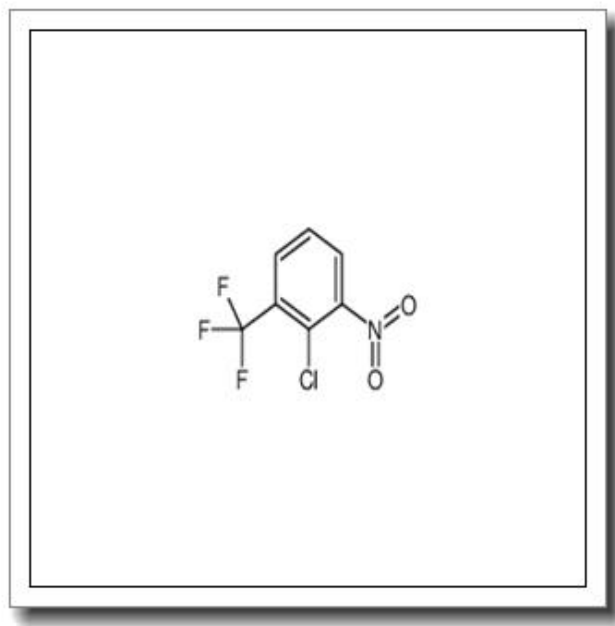


## 2-氯-3-硝基三氟甲苯

*2-Chloro-1-nitro-3-(trifluoromethyl)benzene*



### 产品基本信息

属性	值
化学名称	2-Chloro-1-nitro-3-(trifluoromethyl)benzene
中文名称	2-氯-3-硝基三氟甲苯
CAS 号	39974-35-1
分子式	C <sub>7</sub> H <sub>3</sub> ClF <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>
分子量	225.552
纯度	≥96%

## 产品说明

### 2-氯-3-硝基三氟甲苯产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

2-氯-3-硝基三氟甲苯 (2-Chloro-1-nitro-3-(trifluoromethyl)benzene) 是一种含氟芳香族化合物, CAS 号为 39974-35-1, 分子式为  $C_7H_3ClF_3NO_2$ , 分子量 225.552。该化合物为淡黄色至无色结晶或粉末, 纯度  $\geq 96\%$ , 具有典型的硝基芳烃特征气味。其结构中包含氯、硝基和三氟甲基三个关键官能团, 赋予其高反应活性, 尤其在亲核取代和偶联反应中表现显著。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为有机合成中间体, 该化合物在引入三氟甲基和硝基的协同效应下, 可显著改变目标分子的电子分布和脂溶性, 广泛应用于药物设计和材料科学。三氟甲基的强吸电子特性使其在调节生物活性分子代谢稳定性方面具有独特价值, 常见于抗肿瘤、抗炎药物的结构修饰中。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

在医药领域, 本品是合成含氟喹诺酮类抗生素和抗抑郁剂的关键砌块。农药工业中用于开发高效杀虫剂和除草剂, 其硝基结构可增强靶标结合能力。材料科学方面, 可作为液晶单体或特种聚合物的改性剂, 提升材料耐热性和化学惰性。实验室中常用于研究芳香亲核取代反应机理。

#### 4. 储存条件与使用建议

需密封保存于阴凉干燥处, 推荐温度  $2-8^{\circ}C$ , 避光防潮。开封后建议充氮保护以延长稳定性。操作时需在通风橱中进行, 佩戴防化手套、护目镜及防尘口罩。溶解性测试表明易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂, 水溶性极低, 配制时需选择合适溶剂体系。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度, 批号关联 COA 报告。危险类别为刺激性物质 (皮肤腐蚀/刺激类别 2), UN 编号未列管。意外接触时立即用大量清水冲洗 15 分钟, 若吸

入需转移至空气新鲜处。废弃物处置应遵守当地法规，不可直接排入下水道。运输时按一般化学品处理，避免与强氧化剂混装。

注：具体实验方案请结合文献方法优化，本说明数据基于标准测试条件，实际应用可能因工艺参数差异需进一步验证。