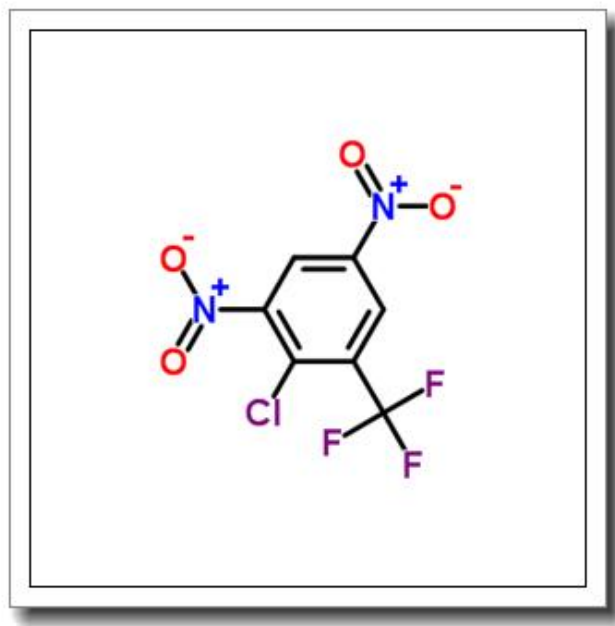


2-氯-3,5-二硝基三氟甲苯

2-Chloro-3,5-dinitrobenzotrifluoride



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-Chloro-3,5-dinitrobenzotrifluoride
中文名称	2-氯-3,5-二硝基三氟甲苯
CAS 号	392-95-0
分子式	C ₇ H ₂ ClF ₃ N ₂ O ₄
分子量	270.55
纯度	≥96%

产品说明

2-氯-3,5-二硝基三氟甲苯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

2-氯-3,5-二硝基三氟甲苯（化学名称：2-Chloro-3,5-dinitrobenzotrifluoride）是一种重要的含氟芳香族化合物，CAS 号为 392-95-0，分子式为 $C_7H_2ClF_3N_2O_4$ ，分子量为 270.55。该化合物为淡黄色至黄色结晶粉末，纯度 $\geq 96\%$ ，具有显著的化学稳定性和反应活性。其结构中的三氟甲基、氯原子和硝基官能团赋予其独特的电子效应和空间位阻特性，使其在有机合成中表现出特殊价值。

2. 生物化学功能与重要性

作为多官能团芳香族衍生物，该化合物可通过亲核取代、还原或偶联反应参与复杂分子构建。硝基的强吸电子效应与三氟甲基的疏水性相结合，使其在药物化学中常用于先导化合物的结构修饰，尤其在抗肿瘤、抗菌剂研发领域具有潜在应用价值。此外，其刚性芳香骨架可作为功能材料（如液晶或高分子单体）的核心结构单元。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于以下领域：

- 医药中间体：用于合成含氟类药物，特别是靶向酶抑制剂类化合物。
- 农药开发：作为除草剂或杀菌剂的关键结构片段。
- 材料科学：参与制备耐高温、低介电常数的高分子材料。
- 科研用途：作为硝化反应或氟化学研究的模型底物。

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 -20°C 至 4°C 冷藏保存。使用时需在干燥惰性气体环境下操作（如氮气手套箱），避免与强氧化剂、还原剂或酸碱物质直接接触。溶解性测试表明其易溶于二甲基亚砜（DMSO）、丙酮，微溶于醇类，使用前建议通过薄层色谱（TLC）或 HPLC 监测稳定性。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 验证纯度 $\geq 96\%$ ，残留溶剂符合 USP 标准。安全数据表明其具有刺激性，操作时应穿戴防护手套、护目镜及防毒面具。皮肤接触后需立即用肥皂水冲洗，吸入暴露需转移至通风处。废弃物处理需遵循当地危险化学品管理条例，建议采用专业焚烧降解。

（注：本说明基于现有研究数据编制，具体应用需结合实验条件进一步验证。）