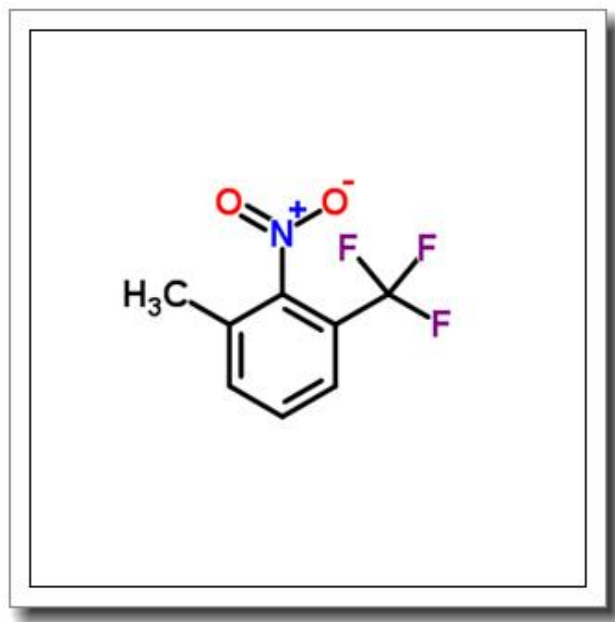


# 3-甲基-2-硝基三氟甲苯

*2-Nitro-3-Methylbenzotrifluoride*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	2-Nitro-3-Methylbenzotrifluoride
中文名称	3-甲基-2-硝基三氟甲苯
CAS 号	92891-23-1
分子式	C <sub>8</sub> H <sub>6</sub> F <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>
分子量	205.134
纯度	≥ 96%

## 产品说明

### 2-硝基-3-甲基三氟甲苯产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

2-硝基-3-甲基三氟甲苯（化学名称：2-Nitro-3-Methylbenzotrifluoride，CAS号：92891-23-1）是一种含氟芳香族硝基化合物，分子式为  $C_8H_6F_3NO_2$ ，分子量 205.134。本品为淡黄色至棕色结晶或粉末，纯度  $\geq 96\%$ ，具有典型的硝基芳香烃气味。其结构中三氟甲基和硝基的强吸电子特性使其具有较高的化学稳定性，同时可作为重要的有机合成中间体。

#### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物在生物化学领域主要作为修饰基团或反应底物，其硝基可通过还原反应转化为氨基，进而参与偶联或重氮化反应。三氟甲基的引入可显著改变分子脂溶性和代谢稳定性，因此在药物设计中被广泛用于先导化合物的结构优化。其独特的电子效应对酶活性位点的相互作用研究也具有参考价值。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

在医药领域，本品是合成抗炎、抗肿瘤药物的重要中间体；在农药化学中用于制备含氟杀虫剂和除草剂；在材料科学中可作为液晶单体或高分子材料的改性剂。实验室中常用于研究亲电取代反应机理，或作为核磁共振（ $^{19}F$ -NMR）分析的标样。

#### 4. 储存条件与使用建议

需避光密封保存于  $-20^{\circ}C$  至  $4^{\circ}C$  干燥环境中，与强氧化剂、还原剂分开放置。使用时应佩戴防护手套和护目镜，在通风橱中操作。溶解性测试表明其易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂，水溶性极低 ( $< 0.1$  g/L)。建议现配现用，避免长期暴露于潮湿环境。

#### 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。根据 GHS 分类，具有皮肤刺激性（类别 2）和眼损伤危险性（类别 1）。泄漏处理需用惰性吸附材料收集，避免扬

尘。急救措施包括：皮肤接触时用大量肥皂水冲洗，吸入后转移至空气新鲜处。废弃物应作为危险化学品处置，符合当地环保法规。

注：本说明基于现有研究数据编制，实际应用前请查阅最新文献并开展小试实验。