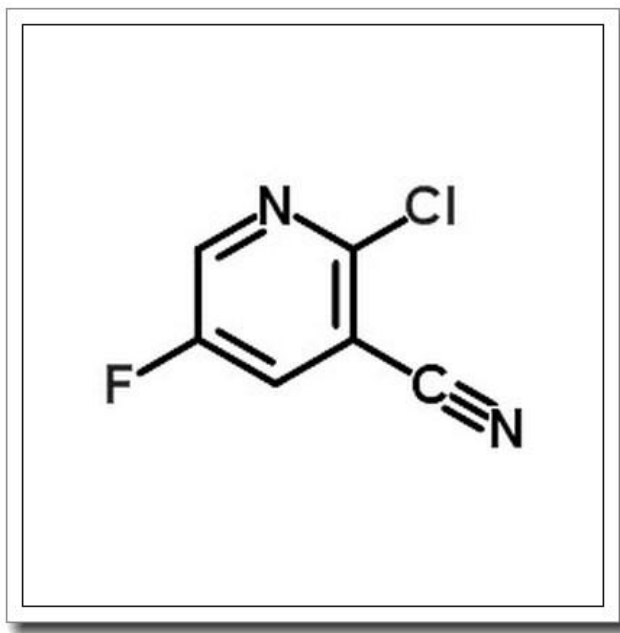


# 2-氯-5-氟烟腈

*2-Chloro-5-fluoronicotinonitrile*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	2-Chloro-5-fluoronicotinonitrile
中文名称	2-氯-5-氟烟腈
CAS 号	791644-48-9
分子式	C <sub>6</sub> H <sub>2</sub> ClFN <sub>2</sub>
分子量	156.545
纯度	>96%

## 产品说明

### 2-氯-5-氟烟腈产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

2-氯-5-氟烟腈 (2-Chloro-5-fluoronicotinonitrile, CAS 号 791644-48-9) 是一种重要的含氟烟碱类衍生物, 分子式为  $C_6H_2ClFN_2$ , 分子量 156.545。本品为白色至类白色结晶性粉末, 纯度  $\geq 96\%$ , 具有显著的芳香性和极性特征。其结构中的氯原子和氟原子赋予分子较高的反应活性, 而氰基则增强了其在偶联反应中的适用性。该化合物在常温下稳定, 但需避免强酸、强碱及还原性环境。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为烟碱酸衍生物, 2-氯-5-氟烟腈是合成多种生物活性分子的关键中间体。其结构中的卤素原子可参与亲核取代反应, 而氰基能进一步转化为羧酸、酰胺等官能团。该化合物在药物化学中尤为重要, 常用于构建含氟杂环结构, 此类结构可增强药物的代谢稳定性和靶标结合能力。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

2-氯-5-氟烟腈广泛应用于医药和农药研发领域。在医药领域, 它是合成抗肿瘤、抗病毒及中枢神经系统药物的重要砌块, 例如用于制备氟代嘧啶类抗癌剂。在农药领域, 可作为杀虫剂和杀菌剂的中间体。此外, 在材料科学中也有潜在应用, 如液晶材料的合成。

#### 4. 储存条件与使用建议

本品需密封保存于干燥、阴凉处, 建议温度  $2-8^{\circ}C$ , 避免光照和潮湿环境。开封后应充惰性气体保护以延长稳定性。使用时需在通风橱中操作, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明, 其易溶于二甲基亚砜 (DMSO) 和丙酮, 微溶于水。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度  $\geq 96\%$ , 残留溶剂符合 ICH 标准。安全数据表明, 该化合物对眼睛和皮肤有刺激性, 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。废弃物处置需遵守当地化学品管理法规，不可直接排入环境。

（注：本说明书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。）