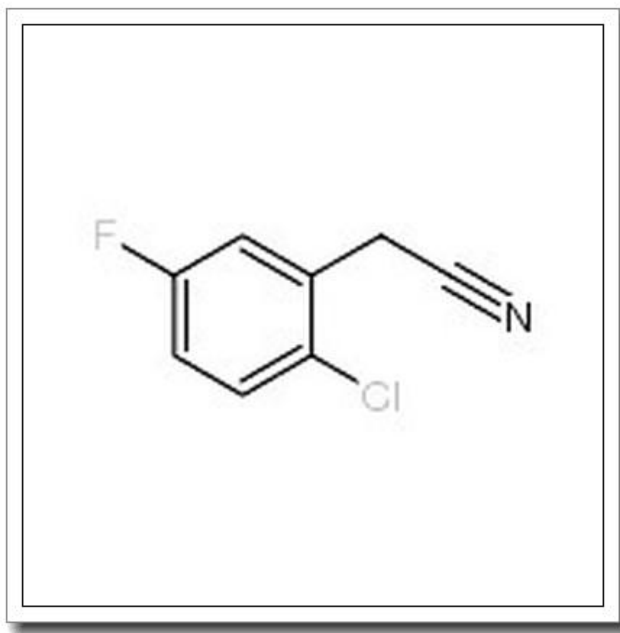


# 2-氯-5-氟苯乙腈

*2-Chloro-5-fluorophenylacetonitrile*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	2-Chloro-5-fluorophenylacetonitrile
中文名称	2-氯-5-氟苯乙腈
CAS 号	395675-23-7
分子式	C <sub>8</sub> H <sub>5</sub> ClFN
分子量	169.583
纯度	>96%

## 产品说明

### 2-氯-5-氟苯乙腈产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

2-氯-5-氟苯乙腈 (2-Chloro-5-fluorophenylacetonitrile) 是一种有机氟化合物，化学式为  $C_8H_5ClFN$ ，分子量为 169.583，CAS 号为 395675-23-7。该化合物为白色至淡黄色结晶或粉末，纯度高于 96%，具有典型的腈类特征性气味。其结构中包含氯和氟两种卤素取代基，赋予其独特的电子效应和反应活性，使其在有机合成中作为重要的中间体。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为苯乙腈衍生物，该化合物可通过氰基的转化反应生成羧酸、酰胺或胺类衍生物，同时苯环上的氯和氟取代基可进一步参与亲核取代或偶联反应。其在药物化学和材料科学中具有重要价值，尤其是作为构建含氟杂环化合物或靶向药物的关键片段。氟原子的引入通常能增强化合物的脂溶性和代谢稳定性，因此在活性分子设计中备受关注。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

2-氯-5-氟苯乙腈广泛应用于医药、农药及功能材料领域。在医药研发中，它是合成抗肿瘤、抗炎或中枢神经系统药物的重要中间体；在农药领域，可用于制备含氟杀虫剂或除草剂；此外，还可作为液晶材料或高分子单体的前体。具体应用中需根据目标产物设计反应路径，例如通过 Suzuki 偶联或亲核芳香取代反应引入其他功能基团。

#### 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°C），避免光照和潮湿环境。开封后建议充氮保护以延长稳定性。使用时应佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩，在通风橱中操作。溶解性测试表明其易溶于丙酮、二甲基亚砜（DMSO），微溶于乙醇，不溶于水，配制溶液时需选择适当溶剂并避免强酸强碱条件。

## 5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，杂质含量符合工业标准。安全数据表明，其急性毒性（LD50）为中等，对皮肤和眼睛有刺激性，操作时需避免直接接触。废弃物处理应遵循当地化学品管理法规，不可随意排放。运输时分类为有害化学品，需贴注相应危险标识（如 GHS06 骷髅标、GHS08 健康危害标）。如发生泄漏，需用惰性吸附材料处理并彻底通风。

（注：本说明基于现有研究数据，实际应用前请查阅最新文献并开展小试验证。）