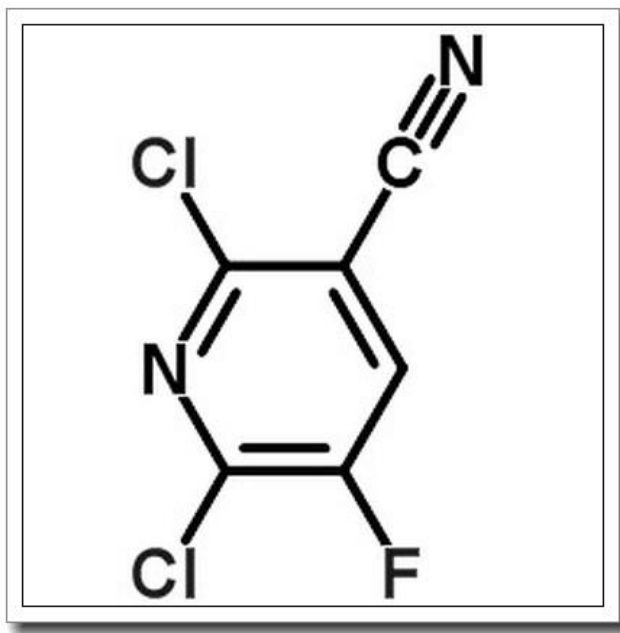


3-氰基-2,6-二氯-5-氟吡啶

2,6-Dichloro-5-fluoro-3-pyridinecarbonitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	2,6-Dichloro-5-fluoro-3-pyridinecarbonitrile
中文名称	3-氰基-2,6-二氯-5-氟吡啶
CAS 号	82671-02-1
分子式	C ₆ HCl ₂ FN ₂
分子量	190.99
纯度	>96%

产品说明

2,6-二氯-5-氟-3-吡啶甲腈产品说明书

1. 产品概述与化学特性

2,6-二氯-5-氟-3-吡啶甲腈（化学名称：2,6-Dichloro-5-fluoro-3-pyridinecarbonitrile）是一种含卤素取代的吡啶衍生物，CAS 号为 82671-02-1，分子式 $C_6HCl_2FN_2$ ，分子量 190.99。本品为白色至类白色结晶性粉末，纯度 >96%，具有吡啶环特有的芳香性及氰基、卤素原子的高反应活性。其结构中 2,6 位的氯原子和 5 位的氟原子赋予分子显著的电子效应和空间位阻，3 位的氰基则增强了其作为中间体的衍生化潜力。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物是医药和农药合成中的关键中间体，尤其适用于构建含氟杂环结构。氟原子的引入可显著改善母体分子的脂溶性、代谢稳定性和生物膜穿透性，而氰基可作为进一步官能团转化的锚定点。在药物化学中，此类结构常见于抗肿瘤、抗感染及中枢神经系统药物的研发；在农用化学品领域，其衍生物可用于开发高效低毒的杀虫剂和除草剂。

3. 主要应用领域与具体用途

- 3.1 医药中间体：用于合成含氟喹诺酮类抗生素或酪氨酸激酶抑制剂的前体化合物。
- 3.2 农药合成：作为新型吡啶类杀虫剂（如新烟碱类）的构建模块。
- 3.3 材料科学：参与制备液晶材料或光电功能分子的含氟吡啶单元。
- 3.4 科研用途：在有机方法学研究中作为卤代芳烃偶联反应的模板底物。

4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中，避光、防潮，温度控制在 2-8℃。长期保存建议充入惰性气体（如氮气）。使用时需在干燥通风环境下操作，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）、二氯甲烷等有机溶剂，水溶性较低，配制溶液时需选择合适的助溶剂。

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 Q3C 标准。安全数据表明其具有刺激性，操作时应佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩。急性毒性 LD50（大鼠经口） > 500 mg/kg，属于有害化学品。废弃物处置需遵守当地法规，不可直接排入下水道。如发生泄漏，需用惰性吸附材料收集并交由专业机构处理。

注：本说明基于现有实验数据编制，具体应用需结合用户工艺验证。技术参数可能因批次略有差异，请以随货质检报告为准。