

三氟甲磺酰胺

trifluoromethanesulfonamide



产品基本信息

属性	值
化学名称	trifluoromethanesulfonamide
中文名称	三氟甲磺酰胺
CAS 号	421-85-2
分子式	CH ₂ F ₃ N ₂ O ₂ S
分子量	149.092
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

三氟甲磺酰胺 (Trifluoromethanesulfonamide, CAS 号 421-85-2) 是一种含氟有机磺酰胺化合物, 分子式为 $\text{CH}_2\text{F}_3\text{NO}_2\text{S}$, 分子量为 149.092。该化合物以白色至类白色结晶或粉末形式存在, 纯度通常高于 96%。其结构中包含强吸电子性的三氟甲基 ($-\text{CF}_3$) 和磺酰胺基团 ($-\text{SO}_2\text{NH}_2$), 赋予其独特的化学稳定性和反应活性。三氟甲磺酰胺易溶于极性有机溶剂 (如甲醇、乙腈), 微溶于水, 在酸性或碱性条件下可发生水解反应。

2. 生物化学功能与重要性

作为三氟甲磺酰基 ($-\text{SO}_2\text{CF}_3$) 的衍生物, 该化合物在有机合成中可作为重要的中间体或保护基团。其磺酰胺基团能够参与氢键形成, 在药物分子设计中常用于增强靶标蛋白结合能力或调节脂溶性。三氟甲基的引入可显著改善化合物的代谢稳定性和生物利用度, 因此在医药和农药领域具有广泛的应用潜力。

3. 主要应用领域与具体用途

三氟甲磺酰胺主要用于以下领域:

- 医药化学: 作为抗病毒药物、酶抑制剂等活性分子的合成砌块, 例如用于 HIV 蛋白酶抑制剂的结构修饰。
- 农药开发: 作为含氟农药的中间体, 提升杀虫剂或除草剂的生物活性。
- 材料科学: 参与制备含氟高分子材料, 改善材料的耐热性和化学稳定性。
- 有机催化: 作为 Lewis 酸催化剂配体或反应助剂使用。

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 $2-8^\circ\text{C}$), 避免与强氧化剂、强酸强碱接触。开封后建议充惰性气体保护以延长保存期限。使用时应佩戴防护手套、护目镜, 在通风橱中操作, 避免吸入粉尘或接触皮肤。溶解时优先选择无水极性溶剂, 若需水溶液体系建议现配现用。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，水分含量控制在 0.5%以下，重金属残留符合 ACS 标准。安全数据表明其急性毒性较低（LD50 大鼠经口 >2000 mg/kg），但仍可能引起眼睛和皮肤刺激。意外接触时需立即用大量清水冲洗，必要时就医。废弃物处理应遵守当地化学品管理法规，不可直接排入下水道。

（注：实际使用前请务必查阅最新版物质安全数据表 MSDS 并执行风险评估。）