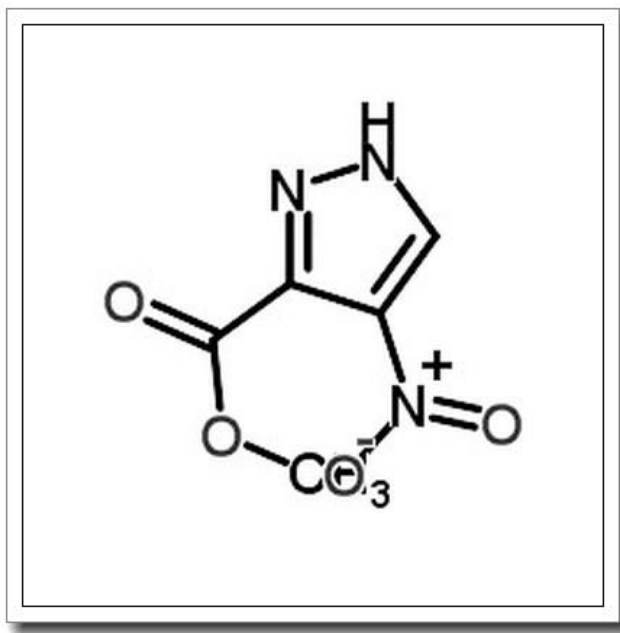


4-硝基-1H-吡唑-3-羧酸甲酯

Methyl 4-nitro-1H-pyrazole-3-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Methyl 4-nitro-1H-pyrazole-3-carboxylate
中文名称	4-硝基-1H-吡唑-3-羧酸甲酯
CAS 号	138786-86-4
分子式	C ₅ H ₅ N ₃ O ₄
分子量	171.111
纯度	>96%

产品说明

4-硝基-1H-吡唑-3-羧酸甲酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

4-硝基-1H-吡唑-3-羧酸甲酯 (Methyl 4-nitro-1H-pyrazole-3-carboxylate) 是一种含硝基的吡唑类衍生物，化学式为 $C_5H_5N_3O_4$ ，分子量 171.111，CAS 号为 138786-86-4。本品为白色至淡黄色结晶性粉末，纯度 >96%，具有典型的硝基芳香化合物特性，可溶于有机溶剂如甲醇、乙醇和 DMSO，微溶于水。其结构中的硝基和酯基赋予其较高的反应活性，可作为重要的医药中间体或生化试剂。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物是吡唑环修饰的典型代表，硝基的强吸电子效应使其成为亲核取代反应的理想底物。在生物化学研究中，其吡唑骨架常用于构建杂环化合物，尤其是具有抗菌、抗炎或抗肿瘤活性的分子。此外，酯基的存在便于进一步水解或衍生化，在药物设计和有机合成中具有关键作用。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于以下领域：

- (1) 医药中间体：作为合成靶向药物（如激酶抑制剂）的核心片段；
- (2) 农药化学：用于开发新型杀虫剂或除草剂的活性成分；
- (3) 材料科学：参与制备含能材料或功能性高分子单体；
- (4) 学术研究：作为硝基杂环化合物的标准品或反应模板。

4. 储存条件与使用建议

建议在干燥、避光条件下密封保存，储存温度 2-8°C。开封后需充惰性气体保护以避免吸潮或降解。使用时需在通风橱中操作，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解推荐使用无水 DMF 或 THF，反应条件应控制 pH 中性至弱酸性以保持稳定性。

5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，残留溶剂符合 USP 标准。安全数据表明，其急性毒性 (LD50) 为 500 mg/kg (大鼠，口服)，属于有害物质，操作时需佩戴防护手套、

护目镜及防尘口罩。废弃物应作为危险化学品处理，不可随意排放。详细安全信息请参阅随附的 MSDS（材料安全数据表）。

注：本说明基于现有实验数据编制，实际应用前请进行小试验证。