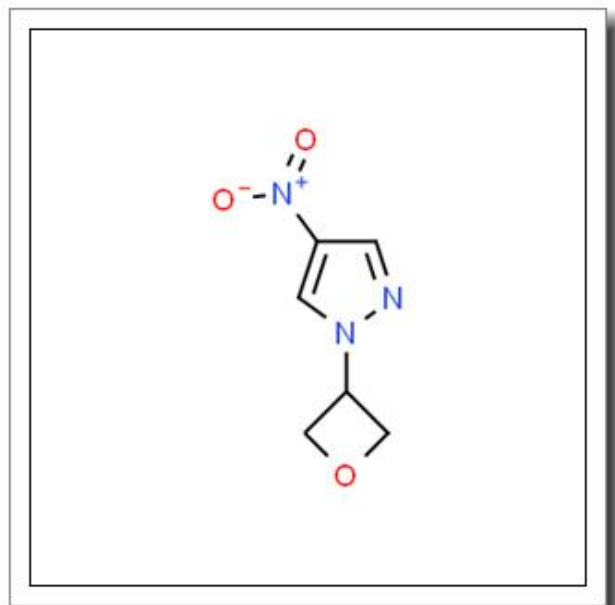


4-Nitro-1-(oxetan-3-yl)-1H-pyrazole

4-Nitro-1-(oxetan-3-yl)-1H-pyrazole



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-Nitro-1-(oxetan-3-yl)-1H-pyrazole
中文名称	4-Nitro-1-(oxetan-3-yl)-1H-pyrazole
CAS 号	1393100-37-2
分子式	C ₆ H ₇ N ₃ O ₃
分子量	169.14
纯度	≥ 96%

产品说明

4-硝基-1-(氧杂环丁烷-3-基)-1H-吡唑产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 4-硝基-1-(氧杂环丁烷-3-基)-1H-吡唑 (4-Nitro-1-(oxetan-3-yl)-1H-pyrazole), CAS 号为 1393100-37-2, 分子式为 C₆H₇N₃O₃, 分子量为 169.14。该化合物为淡黄色至白色结晶粉末, 纯度 ≥96%, 兼具硝基吡唑的电子亲和性与氧杂环丁烷的空间张力特性, 在有机合成中表现出独特的反应活性。其结构中硝基与吡唑环的共轭体系赋予其良好的稳定性, 而氧杂环丁烷基团则提供了进一步功能化修饰的位点。

2. 生物化学功能与重要性

作为含氮杂环化合物, 该分子在药物化学中具有重要价值。硝基吡唑骨架常见于抗菌、抗肿瘤活性分子的设计中, 而氧杂环丁烷片段能增强化合物的细胞膜穿透性, 并可能影响其代谢稳定性。其结构特征使其成为激酶抑制剂、抗生素前体等药物研发的关键中间体, 尤其在靶向性小分子药物的结构优化中具有潜在应用。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于以下领域:

- (1) 医药研发: 作为构建块用于合成具有生物活性的吡唑类衍生物;
- (2) 材料科学: 参与制备含能材料或光电功能材料的中间体合成;
- (3) 农药化学: 作为高效杀虫剂或除草剂的先导化合物修饰基团。

具体实验中可用于 Suzuki 偶联、亲核取代等反应, 或通过硝基还原进一步转化为氨基吡唑类化合物。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 -20℃ 至 4℃ 干燥环境中, 避免光照与湿气。开封后需充惰性气体保护, 长期储存建议分装。使用时需在干燥惰性气氛下操作, 避免与强氧化剂、强酸强碱接触。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, 配制溶液时需注意溶剂选择。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，批次间差异控制在 $\pm 1\%$ 以内。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。MSDS 显示其急性毒性等级为 $LD_{50} > 500 \text{ mg/kg}$ （大鼠经口），但仍需在通风橱中处理。废弃物需按危险化学品规范处置，避免直接排放。

注：本说明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。