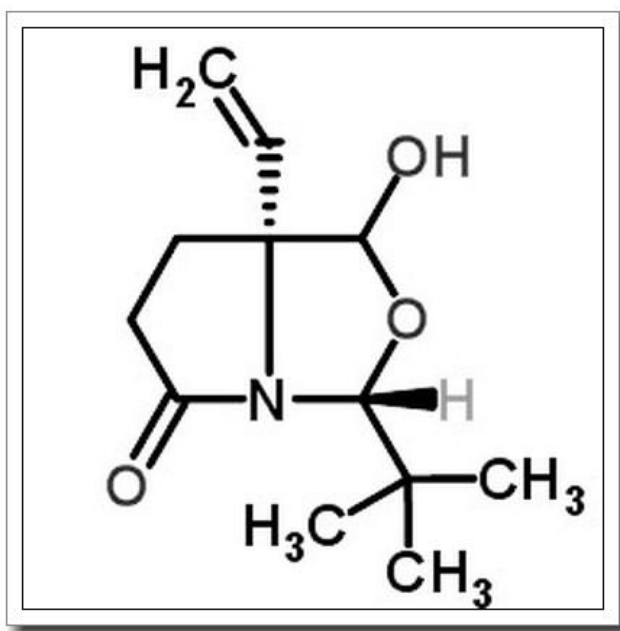


# 罗拉吡坦中间体

(3R, 7aR)-3-(tert-butyl)-1-hydroxy-7a-vinyltetrahydro-3H, 5H-pyrrolo[1, 2-c]oxazol-5-one



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	(3R, 7aR)-3-(tert-butyl)-1-hydroxy-7a-vinyltetrahydro-3H, 5H-pyrrolo[1, 2-c]oxazol-5-one
中文名称	罗拉吡坦中间体
CAS 号	1214741-21-5
分子式	C <sub>12</sub> H <sub>19</sub> N <sub>3</sub> O
分子量	225.284
纯度	>96%

## 产品说明

### 罗拉吡坦中间体产品说明

#### 1. 产品概述与化学特性

本品化学名称为(3R, 7aR)-3-(tert-butyl)-1-hydroxy-7a-vinyltetrahydro-3H, 5H-pyrrolo[1, 2-c]oxazol-5-one, 中文名称为罗拉吡坦中间体, CAS 号为 1214741-21-5。其分子式为 C<sub>12</sub>H<sub>19</sub>N<sub>3</sub>O<sub>3</sub>, 分子量为 225.284, 纯度标准高于 96%。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 具有特定的立体构型(3R, 7aR), 结构中含有叔丁基、乙烯基及杂环体系, 理化性质稳定, 易溶于有机溶剂如甲醇、乙醇和 DMSO, 微溶于水。

#### 2. 生物化学功能与重要性

罗拉吡坦中间体是合成罗拉吡坦(Lorlatinib)的关键前体物质。罗拉吡坦是一种第三代 ALK/ROS1 酪氨酸激酶抑制剂, 用于治疗非小细胞肺癌。该中间体通过参与多步反应构建罗拉吡坦的核心杂环结构, 其立体构型对最终药物的活性具有决定性影响, 因此在药物合成中具有不可替代的作用。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药研发与生产领域, 具体包括:

- 作为罗拉吡坦原料药合成的关键中间体, 用于临床前研究及工业化生产。
- 在药物化学研究中用于结构修饰与构效关系分析, 以优化药物活性。
- 作为标准品用于 HPLC 或 LC-MS 方法开发与质量控制。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议将本品置于密闭容器中, 储存于-20° C 至 4° C 的干燥环境中, 避免光照与潮湿。使用时需在惰性气体(如氮气)保护下操作, 以防止氧化或降解。溶解建议使用无水有机溶剂, 并现配现用。操作人员需穿戴防护装备(手套、护目镜等), 在通风橱中处理。

#### 5. 质量控制与安全信息

本品通过 HPLC 检测确认纯度≥96%, 并提供完整的 COA(质量分析证书)。其潜在

风险包括对眼睛、皮肤及呼吸道的刺激性，应避免直接接触。如发生意外接触，需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物需按危险化学品规范处置。运输时需符合化学品运输法规，标明“有害物质”标签。

以上信息基于现有研究数据，具体应用需结合实验条件进一步验证。