



上海源叶生物科技有限公司
Shanghai yuanye Bio-Technology Co., Ltd
电话: 021-61312973 传真: 021-55068248
网址: www.shyuanye.com
邮箱: shyyssw@sina.com

产品名称: **CID-2858522**
CAS 号: **758679-97-9**
产品货号: **S86429**

生物活性:

Description	CID-2858522 是一种高效的选择性抗原受体介导的 NF-κ B 抑制剂, IC50 为 70 nM。				
IC50 & Target[1]	NF-κB				
	70 nM (IC50)				
Cellular Effect	Cell Line	Type	Value	Description	
				Inhibition of NF-kappaB activation transfected in	
				PMA-stimulated HEK293 cells after 16 hrs by luciferase	
	HEK293	IC50	0.07 μM	reporter gene assay	
				Inhibition of antigen receptor-mediated NF-kappaB activity in	
	HEK293	IC50	0.07 μM	HEK293 cells after 2 hrs by luciferase reporter gene assay	
In Vitro	CID-2858522 (化合物 1) 以 IC50 为 70 nM 抑制抗原受体介导的 NF-κ B 信号通路。在人肝微粒体 (HLM) 和 NADPH 生成系统存在的情况下, CID-2858522 还能抑制睾酮羟化酶, 其 IC50 值为 85 μ M[1]。在用于初步筛选的 HEK293 细胞系中, CID-2858522 以浓度依赖的方式抑制 NF-κ B 报告基因活性, IC50 约为 70 nM, 并且在 0.25-0.5 μ M 浓度下达到最大抑制效果。相比之下, 在高达 4 μ M 的浓度下, CID-2858522 不会抑制 TNF 诱导的 NF-κ B 报告基因活性, 这表明它对由 PMA/离子霉素激活的 NF-κ B 通路具有选择性。细胞活力测定显示, 在≤8 μ M 的浓度下, CID-2858522 对 HEK293 细胞无毒性。此外, CID-2858522 在瞬时转染试验中也强效抑制了 PMA/离子霉素诱导的 NF-κ B 报告基因活性[2]。				
In Vivo	使用一小群三只雄性小鼠对 CID-2858522 (化合物 1a) 进行体内剂量暴露分析。CID-2858522 表现出非线性药代动力学, 与 50 mg/kg 相比, 30 mg/kg 剂量在 0.5 小时测量时间显示出更高的血清水平, 但在 t=3 小时测量时表现出典型的剂量依赖行为。在 50 mg/kg 的剂量下观察到的累积增加可能是由于 CYP3A4 抑制产生的储库效应。在 50 mg/kg 剂量下, 该队列在 t=3 小时表现出明显的发病迹象[2]。				
Solvent&Solubility	细胞实验:				
	DMSO 中的溶解度 : 12.5 mg/mL (26.85 mM); 超声助溶 (<60°C); 吸湿的 DMSO 对产品的溶解度有显著影响, 请使用新开封的 DMSO)				
	Preparing Stock Solutions	Solvent	Mass	1 mg	5 mg
		Concentration			
		1 mM		2.1476 mL	10.7381 mL
5 mM			0.4295 mL	2.1476 mL	
	10 mM		0.2148 mL	1.0738 mL	
*请根据产品在不同溶剂中的溶解度选择合适的溶剂配制储备液; 一旦配成溶液, 请分装保存, 避免反复冻融造成的产品失效。					
储备液的保存方式和期限: -80°C, 2 years; -20°C, 1 year。-80°C 储存时, 请在 2 年内使用, -20°C 储存时, 请在 1 年内使用。					
动物实验:					
请根据您的实验动物和给药方式选择适当的溶解方案。					
以下溶解方案都请先按照 In Vitro 方式配制澄清的储备液, 再依次添加助溶剂:					
——为保证实验结果的可靠性, 澄清的储备液可以根据储存条件, 适当保存; 体内实验的工作液, 建					



	请您现用现配，当天使用； 以下溶剂前显示的百分比是指该溶剂在您配制终溶液中的体积占比；如在配制过程中出现沉淀、析出现象，可以通过加热和/或超声的方式助溶 方案 一 请依序添加每种溶剂： 10% DMSO → 40% PEG300 → 5% Tween-80 → 45% Saline Solubility: ≥ 2.5 mg/mL (5.37 mM); 澄清溶液 此方案可获得 ≥ 2.5 mg/mL（饱和度未知）的澄清溶液。 以 1 mL 工作液为例，取 100 μL 25.0 mg/mL 的澄清 DMSO 储备液加到 400 μL PEG300 中，混合均匀；再向上述体系中加入 50 μL Tween-80，混合均匀；然后再继续加入 450 μL 生理盐水 定容至 1 mL。 生理盐水的配制：将 0.9 g 氯化钠，溶解于 ddH₂O 并定容至 100 mL，可以得到澄清透明的生理盐水溶液。 方案 二 请依序添加每种溶剂： 10% DMSO → 90% (20% SBE-β-CD in Saline) Solubility: 2.5 mg/mL (5.37 mM); 悬浊液; 超声助溶 此方案可获得 2.5 mg/mL 的均匀悬浊液，悬浊液可用于口服和腹腔注射。 以 1 mL 工作液为例，取 100 μL 25.0 mg/mL 的澄清 DMSO 储备液加到 900 μL 20% 的 SBE-β-CD 生理盐水水溶液 中，混合均匀。 2 g SBE-β-CD（磺丁基醚 β-环糊精）粉末定容于 10 mL 的生理盐水中，完全溶解至澄清透明。																																				
参考文献	[1]. Okolotowicz KJ, et al. Selective benzimidazole inhibitors of the antigen receptor-mediated NF-kappaB activation pathway. Bioorg Med Chem. 2010 Mar 1;18(5):1918-24. [2]. Peddibhotla S, et al. Inhibition of protein kinase C-driven nuclear factor-kappaB activation: synthesis, structure-activity relationship, and pharmacological profiling of pathway specific benzimidazole probe molecules. J Med Chem. 2010 Jun 24;53(12):4793-7. [3]. Shi R, et al. Chemical biology strategy reveals pathway-selective inhibitor of NF-kappaB activation induced by protein kinase C. ACS Chem Biol. 2010 Mar 19;5(3):287-99.																																				
完整储备液配制表：																																					
请根据产品在不同溶剂中的溶解度选择合适的溶剂配制储备液；一旦配成溶液，请分装保存，避免反复冻融造成的产品失效。储备液的保存方式和期限：-80℃, 2 years; -20℃, 1 year. -80℃ 储存时，请在 2 年内使用， -20℃ 储存时，请在 1 年内使用。																																					
可选溶剂	<table><tr><td>质量 溶剂体积 浓度</td><td>1 mg</td><td>5 mg</td><td>10 mg</td><td>25 mg</td></tr><tr><td rowspan="6">DMSO</td><td>1 mM</td><td>2.1476 mL</td><td>10.7381 mL</td><td>21.4763 mL</td><td>53.6907 mL</td></tr><tr><td>5 mM</td><td>0.4295 mL</td><td>2.1476 mL</td><td>4.2953 mL</td><td>10.7381 mL</td></tr><tr><td>10 mM</td><td>0.2148 mL</td><td>1.0738 mL</td><td>2.1476 mL</td><td>5.3691 mL</td></tr><tr><td>15 mM</td><td>0.1432 mL</td><td>0.7159 mL</td><td>1.4318 mL</td><td>3.5794 mL</td></tr><tr><td>20 mM</td><td>0.1074 mL</td><td>0.5369 mL</td><td>1.0738 mL</td><td>2.6845 mL</td></tr><tr><td>25 mM</td><td>0.0859 mL</td><td>0.4295 mL</td><td>0.8591 mL</td><td>2.1476 mL</td></tr></table>	质量 溶剂体积 浓度	1 mg	5 mg	10 mg	25 mg	DMSO	1 mM	2.1476 mL	10.7381 mL	21.4763 mL	53.6907 mL	5 mM	0.4295 mL	2.1476 mL	4.2953 mL	10.7381 mL	10 mM	0.2148 mL	1.0738 mL	2.1476 mL	5.3691 mL	15 mM	0.1432 mL	0.7159 mL	1.4318 mL	3.5794 mL	20 mM	0.1074 mL	0.5369 mL	1.0738 mL	2.6845 mL	25 mM	0.0859 mL	0.4295 mL	0.8591 mL	2.1476 mL
质量 溶剂体积 浓度	1 mg	5 mg	10 mg	25 mg																																	
DMSO	1 mM	2.1476 mL	10.7381 mL	21.4763 mL	53.6907 mL																																
	5 mM	0.4295 mL	2.1476 mL	4.2953 mL	10.7381 mL																																
	10 mM	0.2148 mL	1.0738 mL	2.1476 mL	5.3691 mL																																
	15 mM	0.1432 mL	0.7159 mL	1.4318 mL	3.5794 mL																																
	20 mM	0.1074 mL	0.5369 mL	1.0738 mL	2.6845 mL																																
	25 mM	0.0859 mL	0.4295 mL	0.8591 mL	2.1476 mL																																