



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: NE 52-QQ57

CAS 号: 1401728-56-0

产品货号: S87679

生物活性:

Description	NE 52-QQ57 是选择性, 有口服活性的 GPR4 拮抗剂, IC50 为 70 nM。NE 52-QQ57 具有抗炎活性。				
IC50 & Target	IC50: 70 nM (GPR4)[1].				
In Vitro	NE 52-QQ57 effectively blocks GPR4-mediated cAMP accumulation (IC50 26.8 nM in HEK293 cells)[2]。				
In Vivo	NE 52-QQ57 (Compound 13) shows a significant anti-inflammatory effect in the rat antigen induced arthritis model after oral administration at 30 mg/kg bid for 20 days[1]. NE 52-QQ57 (30 mg/kg bid po for 4 days) also prevents angiogenesis in the mouse chamber model as well as pain as demonstrated in the rat complete Freund’ s adjuvant model[1].				
	Animal Model:	Female FVB mice (8-10 weeks)[1]			
	Dosage:	30 mg/kg			
	Administration:	Oral, 4 days, bid			
	Result:	Treatment at 30 mg/kg p.o. bid starting on day 0, the day of the chamber implantation, showed a statistically significant reduction (46.8±10.6%) of tissue growth by day 4. The blood levels of 13 on day 4 at 2 and 16 h after compound application in this model were 9.03±2.87 and 0.09±0.06 μM ^[1] .			
	Animal Model:	Male Wistar Han rats[1]			
	Dosage:	3, 10, and 30 mg/kg			
	Administration:	Oral, 20 days, bid			
	Result:	Displayed not only higher exposures in the rat AIA but also lower plasma protein binding in rat (95%) ^[1]			
	Solvent&Solubility	细胞实验:			
DMSO 中的溶解度 : 20 mg/mL (48.02 mM); ultrasonic and warming and adjust pH to 5 with HCl and heat to 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		SolventMassConcentration	1 mg	5 mg	10 mg
		1 mM	2.4008 mL	12.0042 mL	24.0085 mL
		5 mM	0.4802 mL	2.4008 mL	4.8017 mL
		10 mM	0.2401 mL	1.2004 mL	2.4008 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, 建议您现用现配, 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 mg/mL (4.80 mM); 澄清溶液 此方案可获得 ≥ 2 mg/mL（饱和度未知）的澄清溶液。 以 1 mL 工作液为例，取 100 μL 20.0 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 mg/mL (4.80 mM); 澄清溶液 此方案可获得 ≥ 2 mg/mL（饱和度未知）的澄清溶液。 以 1 mL 工作液为例，取 100 μL 20.0 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。 方案 三 请依序添加每种溶剂： 10% DMSO → 90% Corn Oil Solubility: ≥ 2 mg/mL (4.80 mM); 澄清溶液 此方案可获得 ≥ 2 mg/mL（饱和度未知）的澄清溶液，此方案实验周期在半个月以上的动物实验酌情使用。 以 1 mL 工作液为例，取 100 μL 20.0 mg/mL 的澄清 DMSO 储备液加到 900 μL 玉米油中，混合均匀				
参考文献	[1]. Velcicky J, et al. Development of Selective, Orally Active GPR4 Antagonists with Modulatory Effects on Nociception, Inflammation, and Angiogenesis. J Med Chem. 2017 May 11;60(9):3672-3683. [2]. Hosford PS, et al. CNS distribution, signalling properties and central effects of G-protein coupled receptor 4. Neuropharmacology. 2018 Aug;138:381-392.				
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° 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。					
可选溶剂	质量 溶剂体积 浓度	1 mg	5 mg	10 mg	25 mg
DMSO	1 mM	2.4008 mL	12.0042 mL	24.0085 mL	60.0211 mL
	5 mM	0.4802 mL	2.4008 mL	4.8017 mL	12.0042 mL
	10 mM	0.2401 mL	1.2004 mL	2.4008 mL	6.0021 mL
	15 mM	0.1601 mL	0.8003 mL	1.6006 mL	4.0014 mL



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: shyysw@sina.com

	20 mM	0.1200 mL	0.6002 mL	1.2004 mL	3.0011 mL
	25 mM	0.0960 mL	0.4802 mL	0.9603 mL	2.4008 mL
	30 mM	0.0800 mL	0.4001 mL	0.8003 mL	2.0007 mL
	40 mM	0.0600 mL	0.3001 mL	0.6002 mL	1.5005 mL



源叶