



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: **3-methyl toxoflavin**

CAS 号: **32502-62-8**

产品货号: **S88650**

生物活性:

生物活性:					
Description		3-Methyltoxoflavin 是蛋白质二硫键异构酶 (PDI) 的有效抑制剂, 其 IC50 值为 170 nM。			
IC50 & Target		IC50: 170 nM (PDI)[1]			
Cellular Effect	Cell Line	Type	Value	Description	
	BHK-21	CC50	6.2 μM	Cytotoxicity against hamster BHK-21 cells assessed as reduction in cell viability measured after 48 hrs by MTT assay	
	BT-474	IC50	0.9 μM	Antiproliferative activity against human BT-474 cells assessed as inhibition of cell growth	
	HepG2	CC50	11 μM	Cytotoxicity against human HepG2 cells assessed as reduction in cell viability measured after 48 hrs by MTT assay	
	Huh-7	CC50	1.1 μM	Cytotoxicity against human Huh-7 cells assessed as reduction in cell viability incubated for 48 hrs by MTT assay	
	Huh-7	CC50	1.2 μM	Cytotoxicity against human Huh-7 cells infected with yellow fever virus assessed as reduction in cell viability incubated for 48 hrs by MTT assay	
	Huh-7	CC50	3.2 μM	Cytotoxicity against human Huh-7 cells assessed as reduction in cell viability measured after 48 hrs by MTT assay	
	Huh-7	CC50	> 10 μM	NOVARTIS: Cytotoxicity against human hepatocellular carcinoma cell line (Huh7)	
	Vero 76	CC50	1.7 μM	Cytotoxicity against African green monkey Vero 76 cells assessed as reduction in cell viability incubated for 48 hrs by MTT assay Cytotoxicity against African green monkey Vero 76 cells assessed as reduction in cell viability incubated for 48 hrs by MTT assay	
In Vitro	3-Methyltoxoflavin 是一种有效的蛋白质二硫化物异构酶 (PDI) 抑制剂, IC50 为 170 nM。 3-Methyltoxoflavin 在一组人胶质母细胞瘤细胞系中具有毒性。从筛选结果看, 3-Methyltoxoflavin 是最具细胞毒性的 PDI 抑制剂。新生 RNA 的溴尿苷标记和测序 (Bru-seq) 显示 3-甲基毒黄素诱导 Nrf2 抗氧化反应、内质网应激反应和自噬。3-Methyltoxoflavin 上调血红素加氧酶 1 和 SLC7A11 转录和蛋白质表达, 并抑制 PDI 靶基因, 如 TXNIP 和 EGR1。3-甲基毒黄素诱导的细胞死亡不是通过细胞凋亡或坏死进行的, 而是通过自噬和铁死亡的混合作用[1].				
Solvent&Solubility	细胞实验: DMSO 中的溶解度 : 50 mg/mL (241.32 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)				
		Solvent Mass Concentration	1 mg	5 mg	10 mg



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

	Preparing	1 mM	4.8265 mL	24.1324 mL	48.2649 mL
	Stock Solutions	5 mM	0.9653 mL	4.8265 mL	9.6530 mL
		10 mM	0.4826 mL	2.4132 mL	4.8265 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: 5 mg/mL (24.13 mM); 澄清溶液; 超声助溶 此方案可获得 5 mg/mL 的澄清溶液。 以 1 mL 工作液为例，取 100 μL 50.0 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: 5 mg/mL (24.13 mM); 澄清溶液; 超声助溶 此方案可获得 5 mg/mL 的澄清溶液。 以 1 mL 工作液为例，取 100 μL 50.0 mg/mL 的澄清 DMSO 储备液加到 900 μL 20% 的 SBE-β-CD 生理盐水电溶液 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: $\geq$ 2.5 mg/mL (12.07 mM); 澄清溶液 此方案可获得 $\geq$ 2.5 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 25.0 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]. Kyani A, et al. Discovery and Mechanistic Elucidation of a Class of Protein Disulfide Isomerase Inhibitors for the Treatment of Glioblastoma. ChemMedChem. 2018 Jan 22;13(2):164-177.				

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。



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

可选溶剂	质量 溶剂体积 浓度	1 mg	5 mg	10 mg	25 mg
DMSO	1 mM	4.8265 mL	24.1324 mL	48.2649 mL	120.6622 mL
	5 mM	0.9653 mL	4.8265 mL	9.6530 mL	24.1324 mL
	10 mM	0.4826 mL	2.4132 mL	4.8265 mL	12.0662 mL
	15 mM	0.3218 mL	1.6088 mL	3.2177 mL	8.0441 mL
	20 mM	0.2413 mL	1.2066 mL	2.4132 mL	6.0331 mL
	25 mM	0.1931 mL	0.9653 mL	1.9306 mL	4.8265 mL
	30 mM	0.1609 mL	0.8044 mL	1.6088 mL	4.0221 mL
	40 mM	0.1207 mL	0.6033 mL	1.2066 mL	3.0166 mL
	50 mM	0.0965 mL	0.4826 mL	0.9653 mL	2.4132 mL
	60 mM	0.0804 mL	0.4022 mL	0.8044 mL	2.0110 mL
	80 mM	0.0603 mL	0.3017 mL	0.6033 mL	1.5083 mL
	100 mM	0.0483 mL	0.2413 mL	0.4826 mL	1.2066 mL

源叶