



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: iGOT1-01
CAS 号: 882256-55-5
产品货号: S89106

生物活性:

Description	iGOT1-01 是有效的天冬氨酸转氨酶 1 (谷氨酸草酰乙酸转氨酶 1; GOT1) 抑制剂, 在 MDH 偶联 GOT1 酶法测定中 IC50 为 85 μM, 在 GOT1/GLOX/HRP 测定中 IC50 为 11.3 μM。iGOT1-01 具有抗癌活性。				
IC50 & Target	IC50: 85 μM (MDH coupled GOT1 enzymatic assay) and 11.3 μM (GOT1/GLOX/HRP assay)[1].				
In Vitro	iGOT1-01 has an IC50 of 84.6 μM in the GOT1/MDH1 assay. No inhibitory activity is observed for iGOT1-01 against MDH1 alone at 100 μM[2]. iGOT1-01 (3.125-200 μM; for 3 h) reveals little to no toxicity using two readouts of cell viability in PaTu8902 pancreatic and DLD1 colon cancer cells[2]。				
In Vivo	iGOT1-01 (compound 1a; 20 mg/kg; oral) has reasonable bioavailability and exposure properties (t1/2=0.7 hours, Cmax=4133 ng/mL, AUC(0-24 hours)=11734 hour ng/mL)[1]。				
	Animal Model:	Female CD1 mice with 9 weeks old[1]			
	Dosage:	20 mg/kg (Pharmacokinetic Analysis)			
	Administration:	Oral			
	Result:	Has reasonable bioavailability and exposure properties (t1/2=0.7 hours, Cmax=4133 ng/mL, AUC(0-24 hours)=11734 hour•ng/mL).			
Solvent&Solubility	细胞实验:				
	DMSO 中的溶解度 : 100 mg/mL (312.12 mM); 超声助溶; 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 Concentration	1 mg	5 mg	10 mg
		1 mM	3.1212 mL	15.6060 mL	31.2120 mL
		5 mM	0.6242 mL	3.1212 mL	6.2424 mL
		10 mM	0.3121 mL	1.5606 mL	3.1212 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, 6 months; -20°C, 1 month。-80°C 储存时, 请在 6 个月内使用, -20°C 储存时, 请在 1 个月内使用。				
	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: ≥ 2.5 mg/mL (7.80 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 $\rightarrow$ 90% (20% SBE-β-CD in Saline) Solubility: ≥ 2.5 mg/mL (7.80 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 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 $\rightarrow$ 90% Corn Oil Solubility: ≥ 2.5 mg/mL (7.80 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, 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]. Justin Anglin, et al. Discovery and optimization of aspartate aminotransferase 1 inhibitors to target redox balance in pancreatic ductal adenocarcinoma. Bioorg Med Chem Lett. 2018 Sep 1;28(16):2675-2678. [2]. Melissa C Holt, et al. Biochemical Characterization and Structure-Based Mutational Analysis Provide Insight into the Binding and Mechanism of Action of Novel Aspartate Aminotransferase Inhibitors. Biochemistry. 2018 Nov 27;57(47):6604-6614.

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 $^{\circ}$ C, 6 months; -20 $^{\circ}$ C, 1 month. -80 $^{\circ}$ C 储存时, 请在 6 个月内使用, -20 $^{\circ}$ C 储存时, 请在 1 个月内使用。

可选溶剂	质量 溶剂体积 浓度	1 mg	5 mg	10 mg	25 mg
DMSO	1 mM	3.1212 mL	15.6060 mL	31.2120 mL	78.0299 mL
	5 mM	0.6242 mL	3.1212 mL	6.2424 mL	15.6060 mL
	10 mM	0.3121 mL	1.5606 mL	3.1212 mL	7.8030 mL
	15 mM	0.2081 mL	1.0404 mL	2.0808 mL	5.2020 mL
	20 mM	0.1561 mL	0.7803 mL	1.5606 mL	3.9015 mL
	25 mM	0.1248 mL	0.6242 mL	1.2485 mL	3.1212 mL
	30 mM	0.1040 mL	0.5202 mL	1.0404 mL	2.6010 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

	40 mM	0.0780 mL	0.3901 mL	0.7803 mL	1.9507 mL
	50 mM	0.0624 mL	0.3121 mL	0.6242 mL	1.5606 mL
	60 mM	0.0520 mL	0.2601 mL	0.5202 mL	1.3005 mL
	80 mM	0.0390 mL	0.1951 mL	0.3901 mL	0.9754 mL
	100 mM	0.0312 mL	0.1561 mL	0.3121 mL	0.7803 mL



源叶