



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: YQ128
CAS 号: 2454246-18-3
产品货号: S89289

生物活性:

Description	YQ128 是有效的, 选择性第二代 NLRP3 炎性体抑制剂, IC50 为 0.30 μM。YQ128 能显着和选择性地抑制 IL-1 β 的产生, 但不抑制 TNF- α 的产生。YQ128 可以穿过血脑屏障到达中枢神经系统。YQ128 具有抗炎活性。YQ128 是一种点击化学试剂。它含有 Alkyne 基团, 可以和含有 Azide 基团的分子发生铜催化的叠氮-炔环加成反应 (CuAAc)。				
IC50 & Target[1]	NLRP3 0.30 μM (IC50)	IL-1β			
In Vitro	YQ128 (0.3-100 μM; 30 mins) dose dependently suppressed the release of IL-1 β from peritoneal macrophages upon LPS/ATP challenge with an IC50 of 1.59 μM[1].				
	YQ128 (20 μM; 2 hours) shows no significant toxic effects on hCMEC/D3 cells[1].				
	Cell Viability Assay[1]				
	Cell Line:	Mouse peritoneal macrophages			
	Concentration:	0.3, 1.0, 3.0, 10, 30, 100 μM			
In Vivo	Incubation Time:	30 mins			
	Result:	Suppressed the release of IL-1β from peritoneal macrophages upon LPS/ATP challenge with an IC50 of 1.59 μM.			
	YQ128 (iv; 20 mg/kg) has an intermediate terminal plasma half-life (t1/2) of 6.6 hours after iv administration[1].				
	YQ128 (oral; 20 mg/kg) shows delayed gastrointestinal absorption with a tmax and cmax of 12 h and 73 ng/mL, respectively. Oral bioavailability (Foral) is estimated as 10%[1].				
	YQ128 exhibits extensive extravascular distribution with a large steady-state volume of distribution (Vdss) of 8.5 L/kg and rapid total clearance (CLtot) of 41 mL/min/kg[1].				
In Vivo	YQ128 (10 mg/kg) has been shown to trigger IL-1 β production in a NLRP3- dependent manner in C57BL/6 mice[1].				
	Animal Model:	Sprague-Dawley rats (200-250 g)[1]			
	Dosage:	20 mg/kg (Pharmacokinetic Analysis)			
	Administration:	Iv			
	Result:	Had an intermediate terminal plasma half-life (t1/2) of 6.6 hours after iv administration.			
Solvent&Solubility	细胞实验:				
	DMSO 中的溶解度 : 250 mg/mL (458.62 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	1.8345 mL	9.1725 mL	18.3449 mL
		5 mM	0.3669 mL	1.8345 mL	3.6690 mL
10 mM		0.1834 mL	0.9172 mL	1.8345 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: ≥ 2.08 mg/mL (3.82 mM); 澄清溶液 此方案可获得 ≥ 2.08 mg/mL (饱和度未知) 的澄清溶液。 以 1 mL 工作液为例, 取 100 μL 20.8 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% Corn Oil Solubility: ≥ 2.08 mg/mL (3.82 mM); 澄清溶液 此方案可获得 ≥ 2.08 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 20.8 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]. Jiang Y, et al. Discovery of Second-Generation NLRP3 Inflammasome Inhibitors: Design, Synthesis, and Biological Characterization. J Med Chem. 2019 Oct 31.

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	1.8345 mL	9.1725 mL	18.3449 mL	45.8623 mL
	5 mM	0.3669 mL	1.8345 mL	3.6690 mL	9.1725 mL
	10 mM	0.1834 mL	0.9172 mL	1.8345 mL	4.5862 mL
	15 mM	0.1223 mL	0.6115 mL	1.2230 mL	3.0575 mL
	20 mM	0.0917 mL	0.4586 mL	0.9172 mL	2.2931 mL
	25 mM	0.0734 mL	0.3669 mL	0.7338 mL	1.8345 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: shyyssw@sina.com

	30 mM	0.0611 mL	0.3057 mL	0.6115 mL	1.5287 mL
	40 mM	0.0459 mL	0.2293 mL	0.4586 mL	1.1466 mL
	50 mM	0.0367 mL	0.1834 mL	0.3669 mL	0.9172 mL
	60 mM	0.0306 mL	0.1529 mL	0.3057 mL	0.7644 mL
	80 mM	0.0229 mL	0.1147 mL	0.2293 mL	0.5733 mL
	100 mM	0.0183 mL	0.0917 mL	0.1834 mL	0.4586 mL



源叶