



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: **NIK SMI1**
CAS 号: **1660114-31-7**
产品货号: **S89701**

生物活性:

Description	NIK SMI1 is a potent, selective NF- κ B inducing kinase (NIK) inhibitor, which inhibits NIK-catalyzed hydrolysis of ATP to ADP with IC ₅₀ of 0.23 $\pm$ 0.17 nM. NIK SMI1 is a click chemistry reagent, it contains an Alkyne group and can undergo copper-catalyzed azide-alkyne cycloaddition (CuAAC) with molecules containing Azide groups.			
IC50 & Target	NIK[1]			
In Vitro	NIK SMI1 (Compound 4f) 抑制 NIK 催化的 ATP 水解为 ADP (荧光偏振, FP), IC ₅₀ 为 0.23 $\pm$ 0.17 nM. NIK SMI1 抑制 HEK293 细胞中 NIK SMI1 反应元件调节的萤火虫荧光素酶报告基因的表达式, IC ₅₀ 为 34 $\pm$ 6 nM。与预期的 NIK 抑制剂一致, NIK SMI1 可抑制 p52 (RelB) 的核易位 (IC ₅₀ =70 nM)。NIK SMI1 抑制 BAFF 诱导的 B 细胞 (小鼠) 体外存活, IC ₅₀ 为 373 $\pm$ 64 nM[1]。			
In Vivo	在 7 天的实验过程中, C57BL/6 小鼠每天两次口服 NIK SMI1 或三次注射重组 BAFF 受体融合蛋白 (Br3-mIgG2a) 作为阳性对照。暴露于 100 至 200 mg/kg 之间剂量的非线性是清除机制饱和的结果。以 20、32、18、7.8 mL/kg / min 的剂量分别对 SD 大鼠、CD-1 小鼠、小猎犬和猕猴进行了 niksmi1 的药理学研究。分布容积 (Vd, L/kg) 分别为 1.35、1.58、0.778 和 1.39[1]。			
Solvent&Solubility	细胞实验: DMSO 中的溶解度 : 125 mg/mL (342.11 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
		1 mM	2.7369 mL	13.6844 mL
		5 mM	0.5474 mL	2.7369 mL
		10 mM	0.2737 mL	1.3684 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, 1 year; -20°C, 6 months。-80°C 储存时, 请在 1 年内使用, -20°C 储存时, 请在 6 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: 5% DMSO → 40% PEG300 → 5% Tween-80 → 50% Saline Solubility: $\geq$ 2.5 mg/mL (6.84 mM); 澄清溶液 方案 二 请依序添加每种溶剂: 5% DMSO → 95% (20% SBE- β -CD in Saline) Solubility: $\geq$ 2.5 mg/mL (6.84 mM); 澄清溶液 方案 三 请依序添加每种溶剂: 10% DMSO → 40% PEG300 → 5% Tween-80 → 45% Saline			



	Solubility: ≥ 2.08 mg/mL (5.69 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 四 请依序添加每种溶剂: 10% DMSO $\rightarrow$ 90% (20% SBE-β-CD in Saline) Solubility: ≥ 2.08 mg/mL (5.69 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 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 五 请依序添加每种溶剂: 10% DMSO $\rightarrow$ 90% Corn Oil Solubility: ≥ 2.08 mg/mL (5.69 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。 以下溶解方案, 请直接配制工作液。建议现用现配, 在短期内尽快用完。 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: Corn Oil Solubility: 10 mg/mL (27.37 mM); 悬浊液; 超声助溶 方案 二 请依序添加每种溶剂: 50% PEG300 $\rightarrow$ 50% Saline Solubility: 5 mg/mL (13.68 mM); 澄清溶液; 超声助溶
参考文献	[1]. Blaquiére N, et al. Scaffold-Hopping Approach To Discover Potent, Selective, and Efficacious Inhibitors of NF- κ B Inducing Kinase. J Med Chem. 2018 Aug 9;61(15):6801-6813.

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, 1 year; -20°C, 6 months。 -80°C 储存时, 请在 1 年内使用, -20°C 储存时, 请在 6 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	2.7369 mL	13.6844 mL	27.3688 mL	68.4219 mL
	5 mM	0.5474 mL	2.7369 mL	5.4738 mL	13.6844 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

	10 mM	0.2737 mL	1.3684 mL	2.7369 mL	6.8422 mL
	15 mM	0.1825 mL	0.9123 mL	1.8246 mL	4.5615 mL
	20 mM	0.1368 mL	0.6842 mL	1.3684 mL	3.4211 mL
	25 mM	0.1095 mL	0.5474 mL	1.0948 mL	2.7369 mL
	30 mM	0.0912 mL	0.4561 mL	0.9123 mL	2.2807 mL
	40 mM	0.0684 mL	0.3421 mL	0.6842 mL	1.7105 mL
	50 mM	0.0547 mL	0.2737 mL	0.5474 mL	1.3684 mL
	60 mM	0.0456 mL	0.2281 mL	0.4561 mL	1.1404 mL
	80 mM	0.0342 mL	0.1711 mL	0.3421 mL	0.8553 mL
	100 mM	0.0274 mL	0.1368 mL	0.2737 mL	0.6842 mL



源叶