



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: CCF0058981

CAS 号: 2708934-53-4

产品货号: S89829

生物活性:

Description	CCF0058981 (CCF981), 3-chlorophenyl analogue, is a noncovalent SARS-CoV-2 3CLpro (SC2) inhibitor with an IC50 of 68 nM. CCF0058981 inhibits SC1 (SARS-CoV-1 3CLpro) with an IC50 of 19 nM. CCF0058981 has antiviral efficacy and has the potential for COVID-19 research[1].				
IC50 & Target	IC50: 68 nM (SC2) and 19 nM (SC1)[1]				
In Vitro	CCF0058981 (CCF981) has cytopathic effect (CPE) inhibition (EC50=497 nM) and plaque reduction (EC50=558 nM) in vitro viral replication[1]. CCF0058981 has the 50% cytotoxic concentration (CC50) in the CPE antiviral assay of >50 μM[1]. CCF0058981 has a T1/2 of 21.1 min, a CLInt of 141 mL/min?kg in Human liver microsomes[1].				
Solvent&Solubility	细胞实验: DMSO 中的溶解度 : 25 mg/mL (56.45 mM; 超声助溶; 酸性条件溶解 (HCl 调节, pH≈2); 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	
	Preparing	1 mM	2.2578 mL	11.2892 mL	22.5785 mL
	Stock Solutions	5 mM	0.4516 mL	2.2578 mL	4.5157 mL
		10 mM	0.2258 mL	1.1289 mL	2.2578 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 (5.64 mM); 悬浊液; 超声助溶 此方案可获得 2.5 mg/mL 的均匀悬浊液, 悬浊液可用于口服和腹腔注射。 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 ddH₂ O 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: 2.5 mg/mL (5.64 mM); 悬浊液; 超声助溶 此方案可获得 2.5 mg/mL 的均匀悬浊液, 悬浊液可用于口服和腹腔注射。					



	以 1 mL 工作液为例, 取 100 μ L 25.0 mg/mL 的澄清 DMSO 储备液加到 900 μ L 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。
参考文献	[1]. Sang Hoon Han, et al. Structure-Based Optimization of ML300-Derived, Noncovalent Inhibitors Targeting the Severe Acute Respiratory Syndrome Coronavirus 3CL Protease (SARS-CoV-2 3CL pro). J Med Chem. 2021 Aug 4;acs.jmedchem.1c00598.

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, 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。

可选溶剂	质量 溶剂体积 浓度	1 mg	5 mg	10 mg	25 mg
DMSO	1 mM	2.2578 mL	11.2892 mL	22.5785 mL	56.4462 mL
	5 mM	0.4516 mL	2.2578 mL	4.5157 mL	11.2892 mL
	10 mM	0.2258 mL	1.1289 mL	2.2578 mL	5.6446 mL
	15 mM	0.1505 mL	0.7526 mL	1.5052 mL	3.7631 mL
	20 mM	0.1129 mL	0.5645 mL	1.1289 mL	2.8223 mL
	25 mM	0.0903 mL	0.4516 mL	0.9031 mL	2.2578 mL
	30 mM	0.0753 mL	0.3763 mL	0.7526 mL	1.8815 mL
	40 mM	0.0564 mL	0.2822 mL	0.5645 mL	1.4112 mL
	50 mM	0.0452 mL	0.2258 mL	0.4516 mL	1.1289 mL