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

产品名称：ML417
CAS 号：1386162-69-1
产品货号：S89995

生物活性：

Description	ML417 is a selective and brain penetrant D3 dopamine receptor (D3R) agonist, with an EC50 of 38 nM. ML417 potently promotes D3R-mediated β-arrestin translocation, G protein mediated signaling, and pERK phosphorylation with minimal effects on other GPCR-mediated signaling. ML417 exhibits neuroprotection against toxin-induced neurodegeneration of dopaminergic neurons[1].
IC50 & Target	D3 Receptor 38 nM (EC50)
In Vitro	ML417 exhibits a Ki for the D3R of 1.24 μM. ML417 is a full and potent agonist for multiple signaling pathways associated with D3R activation[1]. ML417 potently inhibits cAMP accumulation with an EC50 of 86 nM and an efficacy identical to that of dopamine. ML417 exhibits submicromolar affinity for only three of the targets, the β1-adrenergic, 5-HT2B serotoninergic, and σ-1 receptors. ML417 stimulates β-arrestin recruitment to the D3R-WT with an EC50 of 1.4 nM[1]. ML417 protects (0.005-5 μM; 24 hours) D3R-expressing dopaminergic neurons from 6-OHDA induced cell death[1].
In Vivo	In vivo pharmacokinetics experiments in mice (using 20 mg/kg; i.p.) reveals that ML417 is brain penetrant and exhibits a plasma half-life of 3.44 hours and a brain half-life of 4.23 hours. ML417 displays a plasma Tmax of 0.5 hours and Cmax of 6500 ng/ml, and a brain Tmax of 0.25 hours and Cmax of 28000 ng/ml[1]. Animal Model: 6-8 week old male C57BL/6 mice[1] Dosage: 20 mg/kg Administration: I.p. (Pharmacokinetic Analysis) Result: Brain penetrant and exhibits a plasma half-life of 3.44 hours and a brain half-life of 4.23 hours. Displayed a plasma Tmax of 0.5 hours and Cmax of 6500 ng/ml, and a brain Tmax of 0.25 hours and Cmax of 28000 ng/ml.
Solvent&Solubility	**细胞实验:** DMSO 中的溶解度 ：50 mg/mL (131.77 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)

	Solvent / Mass / Concentration	1 mg	5 mg	10 mg
Preparing Stock Solutions	1 mM	2.6354 mL	13.1770 mL	26.3539 mL
	5 mM	0.5271 mL	2.6354 mL	5.2708 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

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

	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 → 90% Corn Oil Solubility: ≥ 2.5 mg/mL (6.59 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]. Moritz AE, et al. Discovery, Optimization, and Characterization of ML417: A Novel and Highly Selective D3 Dopamine Receptor Agonist. J Med Chem. 2020;63(10):5526-5567.

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**	2.6354 mL	13.1770 mL	26.3539 mL	65.8848 mL
	5 mM	0.5271 mL	2.6354 mL	5.2708 mL	13.1770 mL
	10 mM	0.2635 mL	1.3177 mL	2.6354 mL	6.5885 mL
	15 mM	0.1757 mL	0.8785 mL	1.7569 mL	4.3923 mL
	20 mM	0.1318 mL	0.6588 mL	1.3177 mL	3.2942 mL
	25 mM	0.1054 mL	0.5271 mL	1.0542 mL	2.6354 mL
	30 mM	0.0878 mL	0.4392 mL	0.8785 mL	2.1962 mL
	40 mM	0.0659 mL	0.3294 mL	0.6588 mL	1.6471 mL
	50 mM	0.0527 mL	0.2635 mL	0.5271 mL	1.3177 mL
	60 mM	0.0439 mL	0.2196 mL	0.4392 mL	1.0981 mL
	80 mM	0.0329 mL	0.1647 mL	0.3294 mL	0.8236 mL
	100 mM	0.0264 mL	0.1318 mL	0.2635 mL	0.6588 mL