



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: **Btk inhibitor 1; (Rac)-IBT6A**

CAS 号: **1412418-47-3**

产品货号: **Y68356**

生物活性:

Description	(Rac)-IBT6A is a racemate of IBT6A. IBT6A is an impurity of Ibrutinib. IBT6A can be used in synthesis of IBT6A Ibrutinib dimer and IBT6A adduct[1]. Ibrutinib is a selective, irreversible Btk inhibitor with an IC50 of 0.5 nM[2].			
In Vitro	IBT6A (Compound 14) can be used in synthesis of Ibrutinib and Ibrutinib-based activity-based probes (ABPs)[3].			
Solvent&Solubility	细胞实验: DMSO 中的溶解度 : 50 mg/mL (129.38 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	2.5877 mL	12.9383 mL
		5 mM	0.5175 mL	2.5877 mL
		10 mM	0.2588 mL	1.2938 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: ≥ 1.67 mg/mL (4.32 mM); 澄清溶液 此方案可获得 ≥ 1.67 mg/mL (饱和度未知) 的澄清溶液。 以 1 mL 工作液为例, 取 100 μL 16.7 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% (20% SBE-β-CD in Saline) Solubility: ≥ 1.67 mg/mL (4.32 mM); 澄清溶液 此方案可获得 ≥ 1.67 mg/mL (饱和度未知) 的澄清溶液。 以 1 mL 工作液为例, 取 100 μL 16.7 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 → 90% Corn Oil Solubility: $\geq 1.67 \text{ mg/mL}$ (4.32 mM); 澄清溶液 此方案可获得 $\geq 1.67 \text{ mg/mL}$ (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 16.7 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]. Somana Siva Prasad, et al. A QUALITY BY DESIGN APPROACH FOR DEVELOPMENT OF SIMPLE AND ROBUST REVERSED PHASE STABILITY INDICATING HPLC METHOD FOR ESTIMATION OF IBRUTINIB AND ITS IMPURITIES. [2]. Honigberg LA, et al. The Bruton tyrosine kinase inhibitor PCI-32765 blocks B-cell activation and is efficacious in models of autoimmune disease and B-cell malignancy. Proc Natl Acad Sci U S A. 2010 Jul 20;107(29):13075-80. [3]. Liu N, et al. Direct and two-step bioorthogonal probes for Bruton's tyrosine kinase based on ibrutinib: a comparative study. Org Biomol Chem. 2015 May 14;13(18):5147-57.

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	2.5877 mL	12.9383 mL	25.8766 mL	64.6914 mL
	5 mM	0.5175 mL	2.5877 mL	5.1753 mL	12.9383 mL
	10 mM	0.2588 mL	1.2938 mL	2.5877 mL	6.4691 mL
	15 mM	0.1725 mL	0.8626 mL	1.7251 mL	4.3128 mL
	20 mM	0.1294 mL	0.6469 mL	1.2938 mL	3.2346 mL
	25 mM	0.1035 mL	0.5175 mL	1.0351 mL	2.5877 mL
	30 mM	0.0863 mL	0.4313 mL	0.8626 mL	2.1564 mL
	40 mM	0.0647 mL	0.3235 mL	0.6469 mL	1.6173 mL
	50 mM	0.0518 mL	0.2588 mL	0.5175 mL	1.2938 mL
	60 mM	0.0431 mL	0.2156 mL	0.4313 mL	1.0782 mL
	80 mM	0.0323 mL	0.1617 mL	0.3235 mL	0.8086 mL
	100 mM	0.0259 mL	0.1294 mL	0.2588 mL	0.6469 mL