



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: shyyw@sina.com

产品名称: **1A-116**
CAS 号: **1430208-73-3**
产品货号: **Y68579**

生物活性:

Description	1A-116, a potent Rac1 inhibitor, is specific for W56 residues, can prevent EGF-induced Rac1 activation and block Rac1-P-Rex1 interaction. 1A-116 can induce apoptosis and inhibit cell proliferation, migration and cycle progression in a concentration-dependent manner. 1A-116 also demonstrates a high antimetastatic activity in vivo[1][2][3].																										
IC50 & Target	IC50: 4 μ M (F3II); 21 μ M (MDA-MB-231)[1]. Rac1[1] Apoptosis[2]																										
In Vitro	1A-116 (48 h) 以浓度依赖性方式抑制 F3II 和 MDA-MB-231 细胞增殖, IC50 分别为 4 μM 和 21 μM[1]. 1A-116 (1, 10 μM; 12 h) 在 F3II 细胞中显著削弱 Rac1 激活, 并以浓度依赖性方式降低 Rac1-GTP 胞内水平[1]. 1A-116 (50、100 μM; 12 小时) 阻断 Rac1-P-Rex1 相互作用[1]. 1A-116 (20 μM; 5 小时间隔超过 25 h) 以昼夜节律方式抑制 LN229 细胞增殖[2]. 1A-116 (10 μM; 16 h) 在 10 HPS 时显著减少细胞迁移, 表现出时间依赖性。(HPS: 血清休克后, 经过的时间 (小时) 记录为同步后小时数 (HPS))[2]. 1A-116 (20、50 μM; 6 h) 以昼夜节律依赖的方式诱导细胞凋亡[2]. 1A-116 (100 nM) 减少 Vav2 和 Rac1 介导的增生的表皮层厚度, 但不是 PAK1 介导的, 它在 GEF-Rac1 水平上表现出抑制 Rac1 的活性[3]. Cell Proliferation Assay[1][2] <table><tr><td>Cell Line:</td><td>MDA-MB-231, F3II, LN229 cells</td></tr><tr><td>Concentration:</td><td>20 μM</td></tr><tr><td>Incubation Time:</td><td>48 h; 5 h intervals over 25 h.</td></tr><tr><td>Result:</td><td>Inhibited cell proliferation in a concentration-dependent and circadian manner.</td></tr></table> Cell Viability Assay[3] <table><tr><td>Cell Line:</td><td>Ker-CT human keratinocytes cells with oncogenic Vav2/Rac1 F28L/PAK1 Tyrosine 423</td></tr><tr><td>Concentration:</td><td>100 nM</td></tr><tr><td>Incubation Time:</td><td></td></tr><tr><td>Result:</td><td>Inhibited Rac1 activity at the GEF-Rac1 level.</td></tr></table> Cell Migration Assay [2] <table><tr><td>Cell Line:</td><td>LN229 cells</td></tr><tr><td>Concentration:</td><td>10 μM</td></tr><tr><td>Incubation Time:</td><td>16 h</td></tr><tr><td>Result:</td><td>Reduced cell migration at 10 HPS which exhibited temporal dependence.</td></tr></table> Apoptosis Analysis[2] <table><tr><td>Cell Line:</td><td>LN229 cells</td></tr></table>	Cell Line:	MDA-MB-231, F3II, LN229 cells	Concentration:	20 μ M	Incubation Time:	48 h; 5 h intervals over 25 h.	Result:	Inhibited cell proliferation in a concentration-dependent and circadian manner.	Cell Line:	Ker-CT human keratinocytes cells with oncogenic Vav2/Rac1 F28L/PAK1 Tyrosine 423	Concentration:	100 nM	Incubation Time:		Result:	Inhibited Rac1 activity at the GEF-Rac1 level.	Cell Line:	LN229 cells	Concentration:	10 μ M	Incubation Time:	16 h	Result:	Reduced cell migration at 10 HPS which exhibited temporal dependence.	Cell Line:	LN229 cells
Cell Line:	MDA-MB-231, F3II, LN229 cells																										
Concentration:	20 μ M																										
Incubation Time:	48 h; 5 h intervals over 25 h.																										
Result:	Inhibited cell proliferation in a concentration-dependent and circadian manner.																										
Cell Line:	Ker-CT human keratinocytes cells with oncogenic Vav2/Rac1 F28L/PAK1 Tyrosine 423																										
Concentration:	100 nM																										
Incubation Time:																											
Result:	Inhibited Rac1 activity at the GEF-Rac1 level.																										
Cell Line:	LN229 cells																										
Concentration:	10 μ M																										
Incubation Time:	16 h																										
Result:	Reduced cell migration at 10 HPS which exhibited temporal dependence.																										
Cell Line:	LN229 cells																										



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

	Concentration:	20, 50 μ M			
	Incubation Time:	6 h			
	Result:	Induced cells apoptosis and in a circadian-dependent manner.			
	Western Blot Analysis[1]				
	Cell Line:	F3II cells			
	Concentration:	1, 10 μ M			
	Incubation Time:	12 h			
	Result:	Blocked Rac1-P-Rex1 interaction. Reduced Rac1-GTP intracellular levels in a concentration-dependent manner.			
In Vivo	1A-116 (3 mg/kg; 静脉注射; 每天一次, 持续 21 天) 显示出高抗转移活性, 体内总转移性肺集落的形成减少了约 60%, 并且没有表现出明显的毒性[1]。 1A-116 (20 mg/kg; 腹腔注射; 每天一次, ZT12 为 73 天, ZT3 为 68 天) 与 ZT3 相比, 在荷瘤小鼠中接受 ZT12 处理可延长存活时间。(ZT: Zeitgeber 时间 12 (ZT12) 定义为关灯时间 (当地时间晚上 7 点), ZT0 定义为开灯时间 (当地时间早上 7 点))[2]。 1A-116 显示出良好的口服可用性[3]。				
	Animal Model:	Female BALB/c inbred mice (8 to 10-week-old; average 20 g)[1]			
	Dosage:	3 mg/kg			
	Administration:	Intravenous injection; once a day for 21 days.			
	Result:	Demonstrated a high antimetastatic activity.			
	Animal Model:	Male NIH Swiss foxN1(Δ/Δ) nude mice (2-month-old; GBM model)[2].			
	Dosage:	20 mg/kg			
	Administration:	Intraperitoneal injection (at ZT3, ZT12); once a day, 73 days for ZT12, 68 days for ZT3.			
	Result:	Increased survival time when treated at ZT12 compared to ZT3 in tumor-bearing mice.			
	Solvent&Solubility	细胞实验: DMSO 中的溶解度 : 100 mg/mL (325.40 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	3.2540 mL	16.2702 mL	32.5404 mL
		5 mM	0.6508 mL	3.2540 mL	6.5081 mL
		10 mM	0.3254 mL	1.6270 mL	3.2540 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: ≥ 2.5 mg/mL (8.14 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。 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 (8.14 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 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: ≥ 2.5 mg/mL (8.14 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]. Cardama GA, et al. Preclinical development of novel Rac1-GEF signaling inhibitors using a rational design approach in highly aggressive breast cancer cell lines. Anticancer Agents Med Chem. 2014;14(6):840-51. [2]. Trebucq LL, et al. Timing of Novel Drug 1A-116 to Circadian Rhythms Improves Therapeutic Effects against Glioblastoma. Pharmaceuticals. 2021 Jul 16;13(7):1091. [3]. González N, et al. Computational and in vitro Pharmacodynamics Characterization of 1A-116 Rac1 Inhibitor: Relevance of Trp56 in Its Biological Activity. Front Cell Dev Biol. 2020 Apr 15;8:240.

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℃, 2 years; -20℃, 1 year。-80℃ 储存时，请在 2 年内使用， -20℃ 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	3.2540 mL	16.2702 mL	32.5404 mL	81.3511 mL
	5 mM	0.6508 mL	3.2540 mL	6.5081 mL	16.2702 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: shyysw@sina.com

	10 mM	0.3254 mL	1.6270 mL	3.2540 mL	8.1351 mL
	15 mM	0.2169 mL	1.0847 mL	2.1694 mL	5.4234 mL
	20 mM	0.1627 mL	0.8135 mL	1.6270 mL	4.0676 mL
	25 mM	0.1302 mL	0.6508 mL	1.3016 mL	3.2540 mL
	30 mM	0.1085 mL	0.5423 mL	1.0847 mL	2.7117 mL
	40 mM	0.0814 mL	0.4068 mL	0.8135 mL	2.0338 mL
	50 mM	0.0651 mL	0.3254 mL	0.6508 mL	1.6270 mL
	60 mM	0.0542 mL	0.2712 mL	0.5423 mL	1.3559 mL
	80 mM	0.0407 mL	0.2034 mL	0.4068 mL	1.0169 mL
	100 mM	0.0325 mL	0.1627 mL	0.3254 mL	0.8135 mL



源叶