

NCT503 ; NCT-503

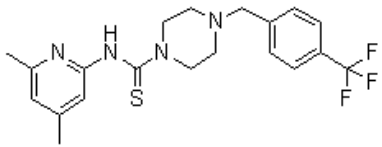
产品编号：MB2521

质量标准：>98%,PHGDH 抑制剂

包装规格：5MG;25MG

产品形式：白色至米色粉末

基本信息

分子式	C20H23F3N4S	结构式	
分子量	408.48		
CAS No.	1916571-90-8		
储存条件	-20°C，避光防潮密闭干燥		
溶解性 (25°C)	DMSO:81 mg/mL (198.29 mM) Water : Insoluble Ethanol : 81 mg/mL (198.29 mM)		
注意事项	溶解性是在室温下测定的，如果温度过低，可能会影响其溶解性。		
其他说明	为了您的安全和健康，请穿实验服并戴一次性手套操作。		

简介：NCT-503 磷酸甘油酸脱氢酶 (PHGDH) 抑制剂，IC₅₀ 值为 2.5 μM。

别名：N-(4,6-Dimethylpyridin-2-yl)-4-(4-(trifluoromethyl)benzyl)piperazine-1-carbothioamide

物理性状及指标：

外观：.....白色至米色粉末

溶解性：.....DMSO:81 mg/mL (198.29 mM);Water : Insoluble;Ethanol : 81 mg/mL (198.29 mM)

含量：.....>98%

储存条件：-20°C，避光防潮密闭干燥

生物活性

产品描述	NCT-503 是 phosphoglycerate dehydrogenase (PHGDH)抑制剂，IC ₅₀ 为 2.5 μM。NCT-503 对其他脱氢酶基本没有活性，对所检测的 168 种 GPCRs 没有或仅具有微弱的交叉反应性。
靶点	PHGDH (Cell-free) 2.5 μM
体外研究	NCT-503 具有合理的水溶解度，良好的吸收度、分布、代谢以及分泌特性 (ADME)。NCT-503 可选择性地阻止葡萄糖来源的丝氨酸合成，但同时引起 SHMT1 依赖性的一碳单位消耗，利用甘氨酸合成丝氨酸。这个无效循环可耗尽细胞内核苷酸，从而导致细胞周期阻滞。
体内研究	在腹腔注射后，NCT-503 在肝脏和大脑中显著分布，具有良好的药物暴露量 (AUC _{last} =14,700 hr*ng/mL)、半衰期 (2.5 hr) 以及 C _{max} (在血浆中约为 20 μM)。NCT-503 对 PHGDH 的抑制可选择性地增加 MDA-MB-468 异种移植瘤的坏死，而对 MDA-MB-231 没有影响。它对 PHGDH 依赖性的 MDA-MB-468 移植瘤具有减少肿瘤生长和重量的作用，但对不依赖于 PHGDH 的 MDA-MB-231 无影响。

用途及描述：科研试剂，广泛应用于分子生物学，药理学等科研方面，严禁用于人体。NCT-503 是磷酸甘油酸脱氢酶 (PHGDH) 的抑制剂，其催化葡萄糖衍生的丝氨酸合成的第一个限速步骤。NCT-503 降低葡萄糖衍生的丝氨酸产生并抑制培养和异种移植肿瘤中 PHGDH 依赖性癌细胞的生长，并在 MDA-MB-468 细胞中引起

G1 / S 细胞周期停滞。 NCT-503 减少了从葡萄糖衍生的和外源的丝氨酸到核苷酸的单碳单元的掺入，这可能有助于其抗癌活性。 对于 PHGDH，NCT-503 具有 2.5 μ M 的 IC 50 值，并且对于一组其他脱氢酶无活性，并且在 168 G-蛋白偶联受体 (GPCR) 中具有最小的交叉反应性。 发现 NCT-503 对于 3-PG 和 NAD⁺ 都是非竞争性的，并且表现出良好的稳定性 (在测定缓冲液中 48 小时后 > 98%) 和水溶性。

储液配置

体 积 浓度	质 量 积	1 mg	5 mg	10 mg
1 mM		2.4481 mL	12.2405 mL	24.4810 mL
5 mM		0.4896 mL	2.4481 mL	4.8962 mL
10 mM		0.2448 mL	1.2241 mL	2.4481 mL
50 mM		0.0490 mL	0.2448 mL	0.4896 mL

经典实验操作 (仅供参考)

动物实验	Animal Models: NOD.SCID mice bearing MDA-MB-231 and MDA-MB-468 orthotropic xenografts Formulation: 5% ethanol, 35% PEG 300, and 60% of an aqueous 30% hydroxypropyl- β -cyclodextrin solution Dosages: 40 mg/kg Administration: i.p.
细胞实验	NCT-503 是在 DMSO 中制备的。MDA-MB-468、BT-20、MT-3 细胞被植入 96 孔板中，允许附着 24 小时。细胞用 NCT-503 治疗 4 天。细胞存活率是通过细胞滴度和发光率来评估的。

【注意】

- 我司产品为非无菌包装，若用于细胞培养，请提前做预处理，除去热原细菌，否则会导致染菌。
- 部分产品我司仅能提供部分信息，我司不保证所提供信息的权威性，以上数据仅供参考交流研究之用。

活性化合物操作注意事项

1 产品分装：您收到货物后最好不要自己进行分包，因为分包环境、包装材料等因素可能导致分包后的产品变质；如您有特殊包装要求，请在订购时候与我们客服代表阐明，当然价格会做适当调整。对于开盖后，长期未使用的，请务必重新密封好，建议 Parafilm 封口膜，并按照相应储存条件使用。如果放置时间过长，超过产品有效期，建议您重新购买，以免影响实验质量。

2 储备液制备：大部分试剂的溶液形式稳定性较差，请优先采用现用现配的方式。如需制备储存液，请选用合适溶剂，细胞培养类多选择 DMSO，储备液制备完成后请于零下 80 摄氏度储存，一般可以稳定存在 3-6 个月以上。在使用前，再对储备液进行稀释。避免储备液反复冻融。

3 细胞培养工作液制备：请根据个人需要正确计算浓度，稀释储备液或者直接用粉末配置工作液。由于大部分化合物是脂溶性的，所以使用水性溶剂（如 PBS）稀释时，可能会析出沉淀，可通过超声使固体重新溶解，不会对实验产生影响。如用 DMSO 作为溶剂，请确保 DMSO 最终使用浓度 < 0.3%，以避免细胞毒性。

灭菌方式，我们建议通过 0.22UM 微膜过滤方式除菌，请勿采用紫外，射线或者高温灭菌方式，否则会影响化合物活性，甚至破坏其结构导致彻底失活。

4 体内动物实验应用：由于很多化合物是脂溶性的，动物实验工作液配制失活，可能会需要加入一些药用辅料作为助溶剂，如吐温，CMC-NA，甘油等，具体需要客户查阅相关文献决定。如使用 DMSO，请确保 DMSO 的终浓度 < 5%，以避免毒性作用。给药剂量设计时候，可以参考下表

动物体表面积等效剂量换算表

物种	体重(KG)	体表面积(M2)	Km 系数
狒狒	12	0.6	20
狗	10	0.5	20
猴	3	0.24	12
兔	1.8	0.15	12
豚鼠	0.4	0.05	8
大鼠	0.15	0.025	6
仓鼠	0.08	0.02	5
小鼠	0.02	0.007	3

动物 A(mg/kg) = 动物 B(mg/kg) X 动物 B 的 Km 系数 / 动物 A 的 Km 系数

5 关于产品到货处理及验收

您收到产品后，请及时查验产品的包装完整性，并对数量进行确认。对于很多微量的产品，数量低于 500MG 的，我们出厂前都是保证正确数量包装的。由于产品包装可能在运输过程中倒置，从而导致产品附着在管壁或者盖子上，这时候请不要先打开盖子，需正位放置轻轻拍打，使产品沉降到官底。对于液体产品，可以在 200 转左右稍作离心，官底收集液体，从而避免损失。

产品标签标示重量会有一定成了误差，在下面范围内均属于我司正常范围，望周知

标示重量范围	误差范围
1-20MG	0.1MG
50-500MG	1MG
>1G	3-5MG

为什么会看起来包装瓶是空的，如果您购买的产品的量非常小，同时有些产品在冻干的过程中粘附在管壁上形成薄薄的一层，可能观察不到产品的存在。您可以加入指定溶剂（参照操作手册）并涡旋或超声震荡使之完全溶解。

对于蜡状或油状的的产品很难取出称量它们的质量，我们建议您用合适的溶剂直接溶解该化合物；对于具有吸湿性的化合物，暴露在空气中会吸收水分，呈现液滴状，这种产品需要放置在干燥器中保存。