

**Simeprevir (TMC435)**

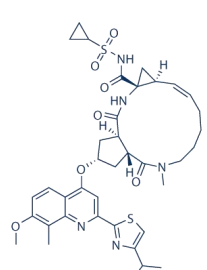
产品编号: MB4397

质量标准: &gt;98%,BR

包装规格: 10mg

产品形式: solid

**基本信息**

分子式	C38H47N5O7S2	结构式	
分子量	749.94		
CAS No.	923604-59-5		
储存条件	-20℃, 避光防潮密闭干燥		
溶解性 (25℃)	H2O : Insoluble		
	DMSO: 100 mg/mL (133.34 mM)		
	Ethanol: 4 mg/mL (5.33 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:** Simeprevir 一种竞争性的、可逆的、非共价结合的大环 hepatitis C virus (HCV) NS3/4A protease 抑制剂, 直接抑制 HCV 病毒。它对 HCV NS3/4A(genotypes 1a, 1b, 2, 4, 5, and 6)的平均 IC50 值小于 13 nM, 而对 genotype 3 的 IC50 值为 37 nM。

**物理性状及指标:**

外观: .....粉末

溶解性: .....H2O : Insoluble ; DMSO: 100 mg/mL (133.34 mM); Ethanol: 4 mg/mL (5.33 mM)

含量: .....&gt;98%

**储存温度:** -20℃, 避光防潮密闭干燥

**生物活性**

<b>描述</b>	Simeprevir 一种竞争性的、可逆的、非共价结合的大环 hepatitis C virus (HCV) NS3/4A protease 抑制剂, 直接抑制 HCV 病毒。它对 HCV NS3/4A(genotypes 1a, 1b, 2, 4, 5, and 6)的平均 IC50 值小于 13 nM, 而对 genotype 3 的 IC50 值为 37 nM。	
<b>IC50 &amp; Target</b>	HCV NS3/4A protease	
<b>体外</b>	Simeprevir exhibits potent inhibition on NS3/4A protease of genotypes 1a, 1b, 2, 4, 5, and 6, with a medium inhibitory concentration (IC50) <13 nM for all HCV NS3/4A enzymes tested. However, the IC50 for genotype 3 is 37 nM. In vitro, simeprevir is also an inhibitor of bilirubin transporters OATP1B1 and MRP2. It is a more potent inhibitor of OATP1B1 (IC50=720 nM), which is primarily responsible for transporting unconjugated bilirubin, than MRP2 (IC50 around 10,000 nM), primarily a conjugated bilirubin transporter	

体内	<p>In vivo, simeprevir has a relatively long absorption phase, reaching maximum concentration (Cmax) after 4-6 hours. It is extensively (99.9%) bound to plasma proteins, mainly to albumin. The absolute bioavailability is 44% after a single oral administration. In rats, The liver to blood ratio is 29:1, which means good distribution to the liver. For humans, in preclinical studies, the liver to plasma concentration ratio is really high (ratio of 39). The highest tissue/plasma AUC ratios are observed in the small intestine (ratio of 128). While tissue simeprevir concentrations reaches peak values within 4 hours postdosing, simeprevir concentrations in liver remains above the EC99 for up to 31 hours postdosing, and plasma concentrations are higher than the EC99 at 8 hours and around the EC50 at 24 hours postdosing. The AUC24h of simeprevir is increased by 61%-69% when administered with food. Simeprevir should therefore be taken with food. Simeprevir is also a substrate and inhibitor of P-glycoprotein. Simeprevir is metabolized by CYP3A4 and eliminated by biliary excretion. It is also an inhibitor of gut cytochrome 3A4 but not hepatic CYP3A4.</p>
----	--

美仑相关产品推荐(更多相关靶点抑制剂请详询官网或客服)

MB2318	Boceprevir
MB3614	Velpatasvir
MB3616	Grazoprevir (MK-5172)

**储液配置及储存:** 按表中溶解性配置; 如溶解困难, 可以通过快速搅拌, 超声或温和加热(在 45-60°C 下水浴)。液体稳定性报道的很少, 建议现配现用, 如需储存, 建议: -20°C 1-3 月; -80°C 3-6 月。

浓度	DMSO 质量 / 体积		
	1 mg	5 mg	10 mg
1 mM	1.3334 mL	6.6672 mL	13.3344 mL
5 mM	0.2667 mL	1.3334 mL	2.6669 mL
10 mM	0.1333 mL	0.6667 mL	1.3334 mL
50 mM	0.0267 mL	0.1333 mL	0.2667 mL

**【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, 使产品沉降到管底。对于液体产品, 可以在 200 转左右稍作离心, 管底收集液体, 从而避免损失。产品标签标示重量会有一定误差, 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。