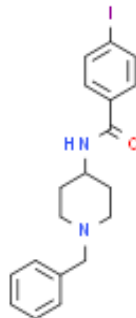


## Product Data Sheet

|                                                          |                                                                                    |              |           |
|----------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------|--------------|-----------|
| Cas No.:                                                 | 155798-08-6                                                                        | Cat. No.:    | PC11073   |
| Product Name:                                            | 4-IBP                                                                              |              |           |
| Product synonym:                                         | -                                                                                  |              |           |
| Chemical name:                                           | 4-IBP                                                                              |              |           |
| MF:                                                      | C19H21N2OI                                                                         | FW:          | 420.28684 |
| Purity:                                                  | ≥98%                                                                               | Batch No.:   | -         |
| Storage:                                                 |                                                                                    |              |           |
| Structural formula:                                      |  |              |           |
| λmax:                                                    | -                                                                                  | Formulation: | -         |
| Solubility :                                             |                                                                                    |              |           |
| SMILES :                                                 | O=C(NC1CCN(CC2=CC=CC=C2)CC1)C3=CC=C(I)C=C3                                         |              |           |
| InChI Code:                                              | -                                                                                  |              |           |
| InChI Key:                                               |                                                                                    |              |           |
| WARNING This product is not for human or veterinary use. |                                                                                    |              |           |

## Product Description

σ<sub>1</sub>激动剂,4-IBP是一种选择性σ<sub>1</sub> 激动剂,高亲和性地结合到σ<sub>1</sub> 受体 (K<sub>i</sub> = 1.7 nM) 对 σ<sub>2</sub> 受体的亲和力稍弱 (K<sub>i</sub> = 25.2 nM)

### 生物活性

4-IBP is a selective σ<sub>1</sub> agonist with a high level of affinity for the σ<sub>1</sub> receptor (K<sub>i</sub> = 1.7 nM) and a moderate affinity for the σ<sub>2</sub> receptor (K<sub>i</sub> = 25.2 nM) . IC<sub>50</sub> value: 1.7 nM (K<sub>i</sub>) Target: σ<sub>1</sub> 体外研究: 4-IBP is a σ<sub>1</sub> receptor agonist, decreases the migration of human cancer cells, including glioblastoma cells. 4-IBP is used to investigate whether targeting the σ<sub>1</sub> receptor could modify 体外研究 the migration rates of human cancer cells and increase the sensitivity of metastasizing human A549 NSCLC cells and infiltrating human glioblastoma cells to cytotoxic insults of either proapoptotic or proautophagic drugs.[1] in vivo: 4-IBP increases the antitumor effects of temozolomide and irinotecan in immunodeficient mice that were orthotopically grafted with invasive cancer cells.[1]

|      |            |       |          |
|------|------------|-------|----------|
| 包装储存 | Powder     | -20°C | 3 years  |
|      |            | 4°C   | 2 years  |
|      | In solvent | -80°C | 6 months |
|      |            | -20°C | 1 month  |

**体外研究:****DMSO : 100 mg/mL (237.93 mM; Need ultrasonic)**

| 配制储备溶液 | 溶剂体积<br>质量<br>浓度 | 1 mg      | 5 mg       | 10 mg      |
|--------|------------------|-----------|------------|------------|
|        | 1 mM             | 2.3793 mL | 11.8965 mL | 23.7931 mL |
|        | 5 mM             | 0.4759 mL | 2.3793 mL  | 4.7586 mL  |
|        | 10 mM            | 0.2379 mL | 1.1897 mL  | 2.3793 mL  |

\* 产品不同，其溶解度不同。建议根据产品选择合适的溶剂配制储备溶液；配成溶液后，建议分装保存，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, 6 months; -20°C, 1 month。-80°C 储存时，建议在 6 个月内使用，-20°C 储存时，建议在 1 个月内使用。

**体内研究:**

建议根据您的[实验动物](#)和[给药方式](#)选择适当的溶解方案。以下溶解方案都建议先按照 **体外研究** 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

1. 建议依照次序添加每种溶剂：10% DMSO 40% PEG300 5% Tween-80 45% saline

Solubility:  $\geq 2.5$  mg/mL (5.95 mM); Clear solution

此方案可获得  $\geq 2.5$  mg/mL (5.95 mM，饱和度未知) 的澄清溶液。

以 1 mL 工作液为例，取 100  $\mu$ L 25.0 mg/mL 的澄清 DMSO 储备液加到 400  $\mu$ L PEG300 中，混合均匀；向上述体系中加入 50  $\mu$ L Tween-80，混合均匀；然后继续加入 450  $\mu$ L 生理盐水定容至 1 mL。

将 0.9 g 氯化钠，完全溶解于 100 mL ddH<sub>2</sub>O 中，得到澄清透明的生理盐水溶液

2. 建议依照次序添加每种溶剂：10% DMSO 90% corn oil

Solubility:  $\geq 2$  mg/mL (4.76 mM); Clear solution

此方案可获得  $\geq 2$  mg/mL (4.76 mM，饱和度未知) 的澄清溶液，此方案不适用于实验周期在半个月以上的实验。

以 1 mL 工作液为例，取 100  $\mu$ L 20.0 mg/mL 的澄清 DMSO 储备液加到 900  $\mu$ L 玉米油中，混合均匀。

\*

溶解度数据