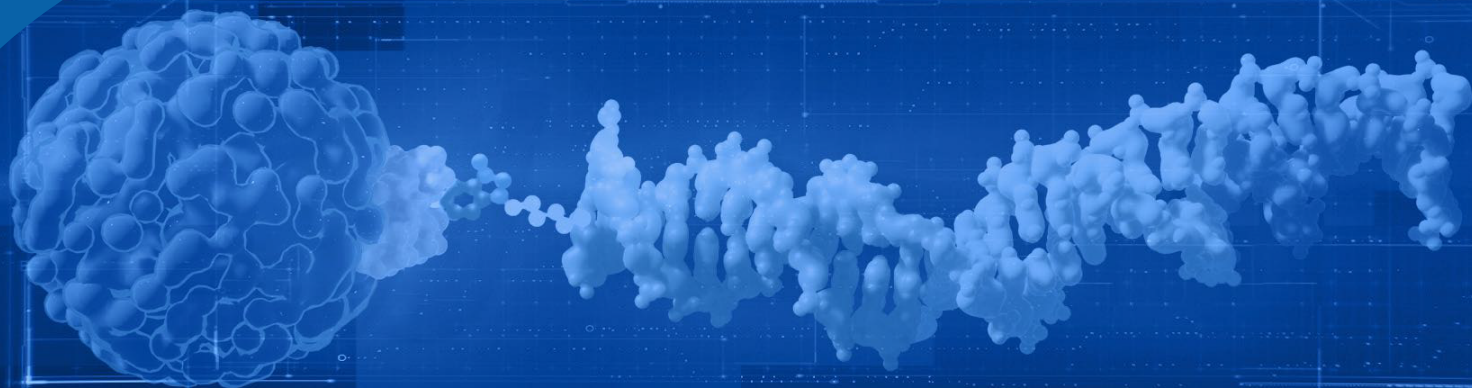




HitS 官网



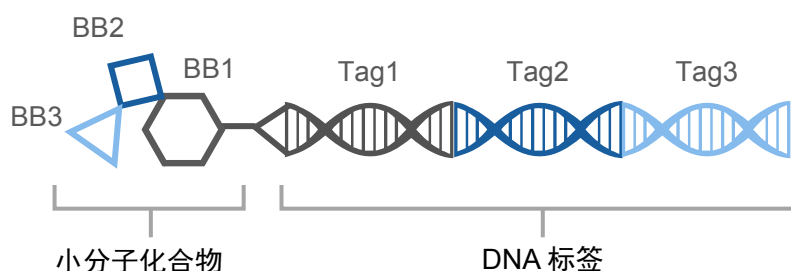
用户手册



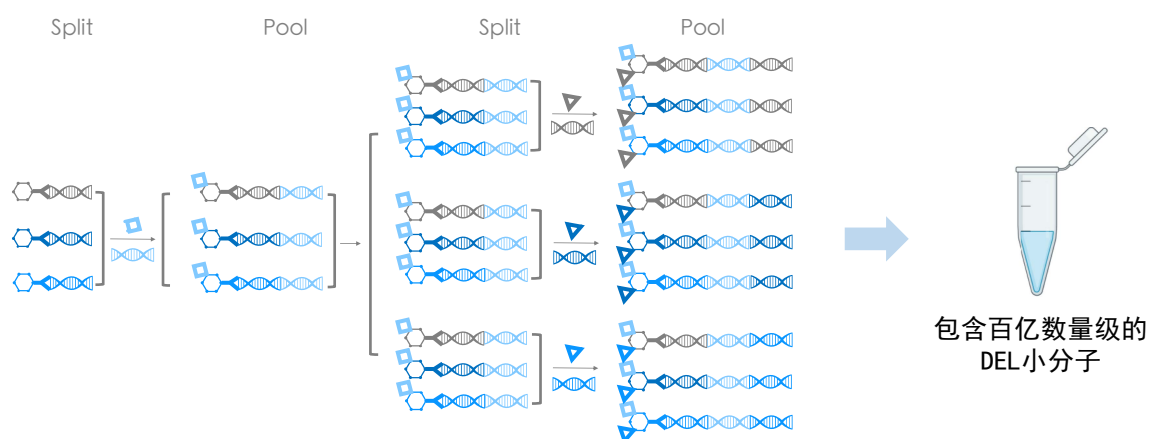
药物发现的新引擎

DNA编码化合物库(DEL)作为一种苗头化合物发现技术，可以通过快速筛选数亿种小分子化合物，获得新颖的化合物结构。旨在新药物研发阶段，助力苗头化合物的发现、验证与优化。

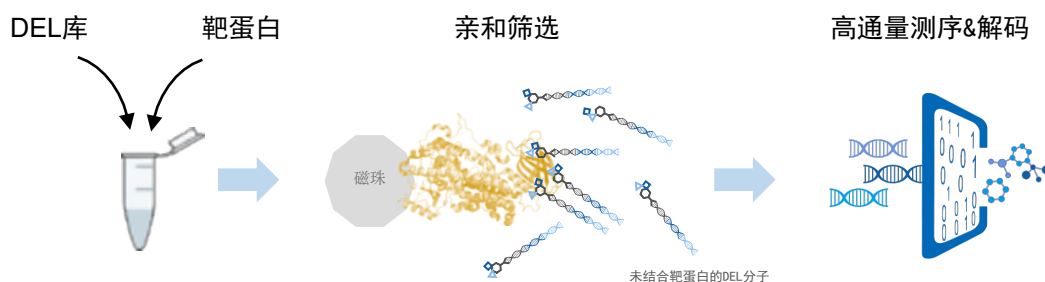
DEL分子示意图（3循环）



DEL库的合成沿用了组合化学的原理，基于“Split and Pool”的方法，实现库分子种类的几何级增长。



一根试管，亿级筛选，无限潜能，即刻释放。通过高通量测序技术，解码DEL分子的专属DNA标签，快速获得针对靶点的苗头化合物信息。



产品介绍

DELlight试剂盒采用自助式筛选模式，用户在自己的实验室里即可完成针对百亿种小分子化合物筛选实验，靶点信息保密，筛选风险极低。



靶点信息全保密



数据包兼容性强

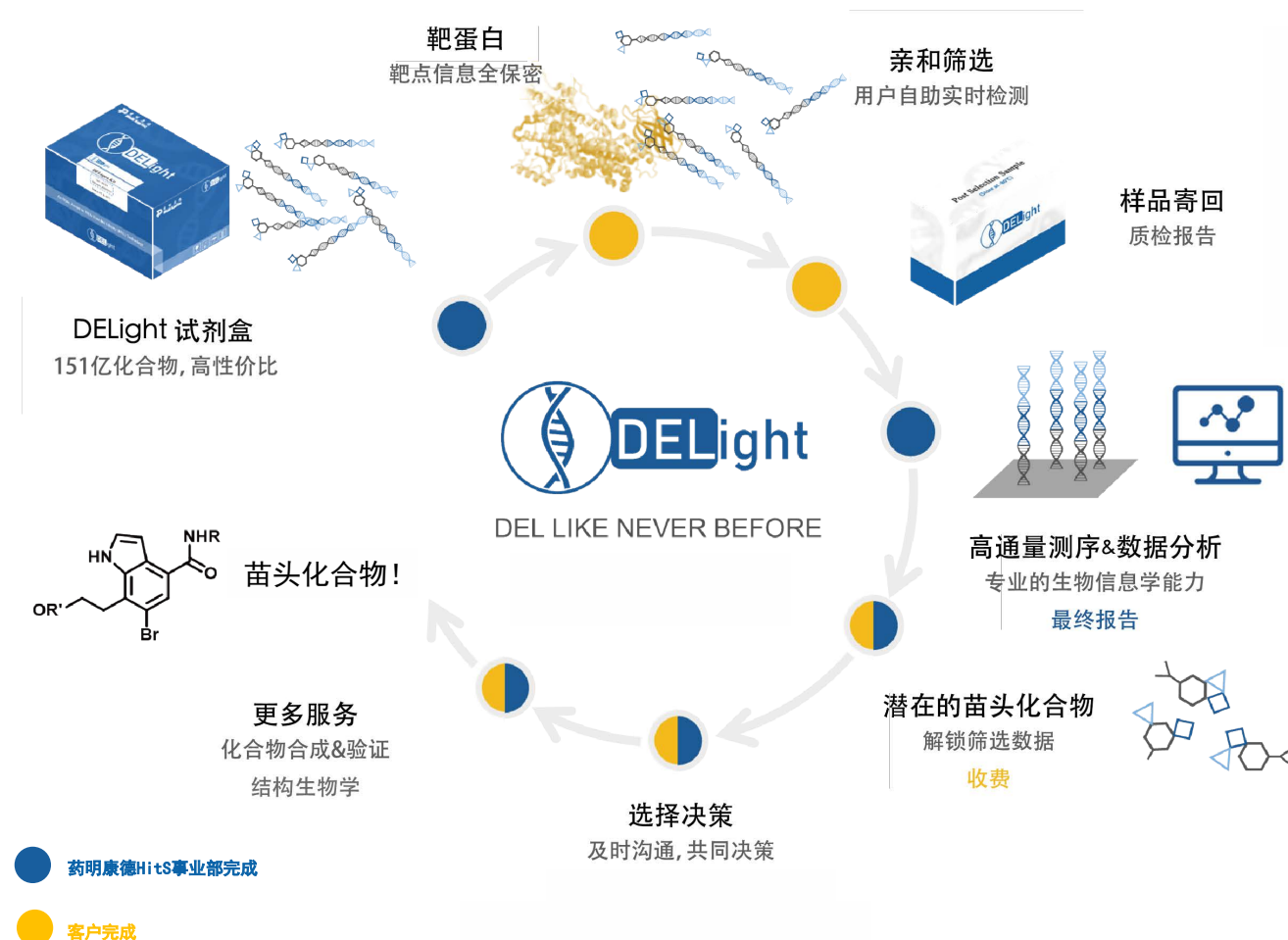


化学空间均衡



项目周期短

DELlight 用户能够在自己的实验室进行DEL亲和筛选实验，药明康德HitS事业部负责后续样品处理、高通量测序和数据分析。

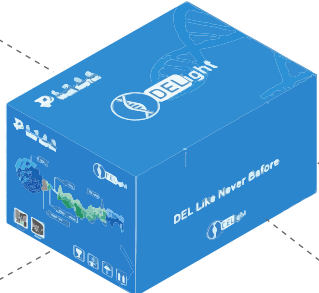


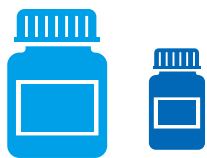
DELIGHT产品服务内容

DELIGHT 试剂盒



- DELIGHT化合物库样品×4
(用于4个实验条件)
- 58个库，151亿种小分子化合物





- Sheared salmon sperm DNA
- 10×PBS buffer (containing 0.5% Tween 20)
用于制备洗脱缓冲液和筛选缓冲液

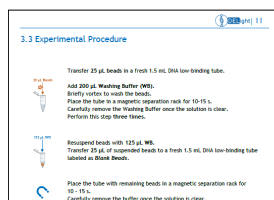


- 实时质量控制检测材料盒
- 包括标样、PCR 预混液和扩增引物

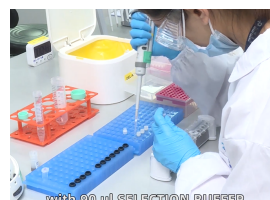


- 样品寄回管
- 请寄回药明康德HitS事业部

技术支持



操作手册—分步详解



筛选实验视频教程



DELIGHT教学实验室
(苏州/波士顿/慕尼黑)

具体服务

样品处理	▪ 样品定量—qPCR ▪ 样品扩增—PCR
高通量测序	▪ Illumina测序平台
数据分析&在线平台	▪ DNA序列解码 ▪ 数据标准化 ▪ 在线的数据可视化平台

筛选数据包

DELIGHT用户可选择付费，解锁筛选得到的相关小分子的化学结构数据包。

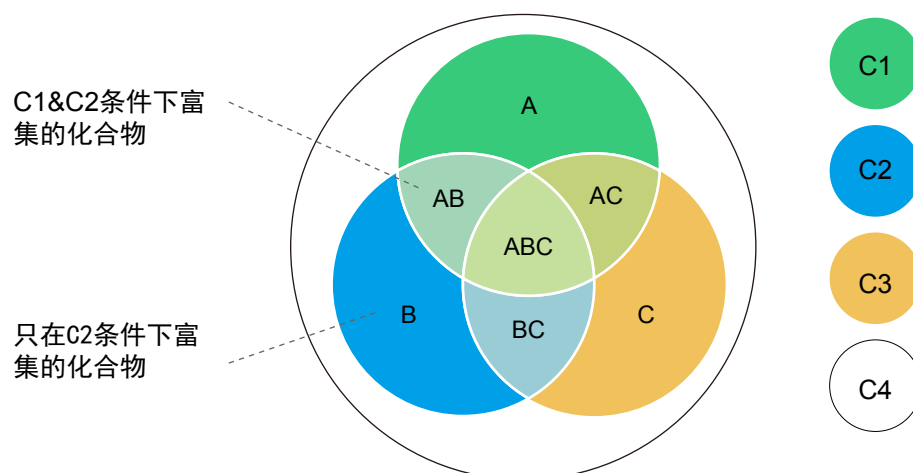
DELIGHT筛选前准备

实验设计

常见的DELIGHT筛选实验设计

- 不同种类的蛋白样品
- 感兴趣的结构域或变构体
- 蛋白样品与其他成分的组合，如加入抑制剂等

#	1	2	3	4
实验条件	蛋白1	蛋白1+抑制剂	蛋白1_D1	对照组
实验目的	主要靶点	封闭结合位点	特定结构域	去除背景噪音



蛋白&磁珠

蛋白要求：

- 能与磁珠高效结合的标签
- 纯度高、同质性好且折叠正确

磁珠要求：

- 有效捕捉蛋白标签
- 推荐使用磁珠，如HisPur™Ni-NTA
- 亲和选择前需进行蛋白捕获预试验

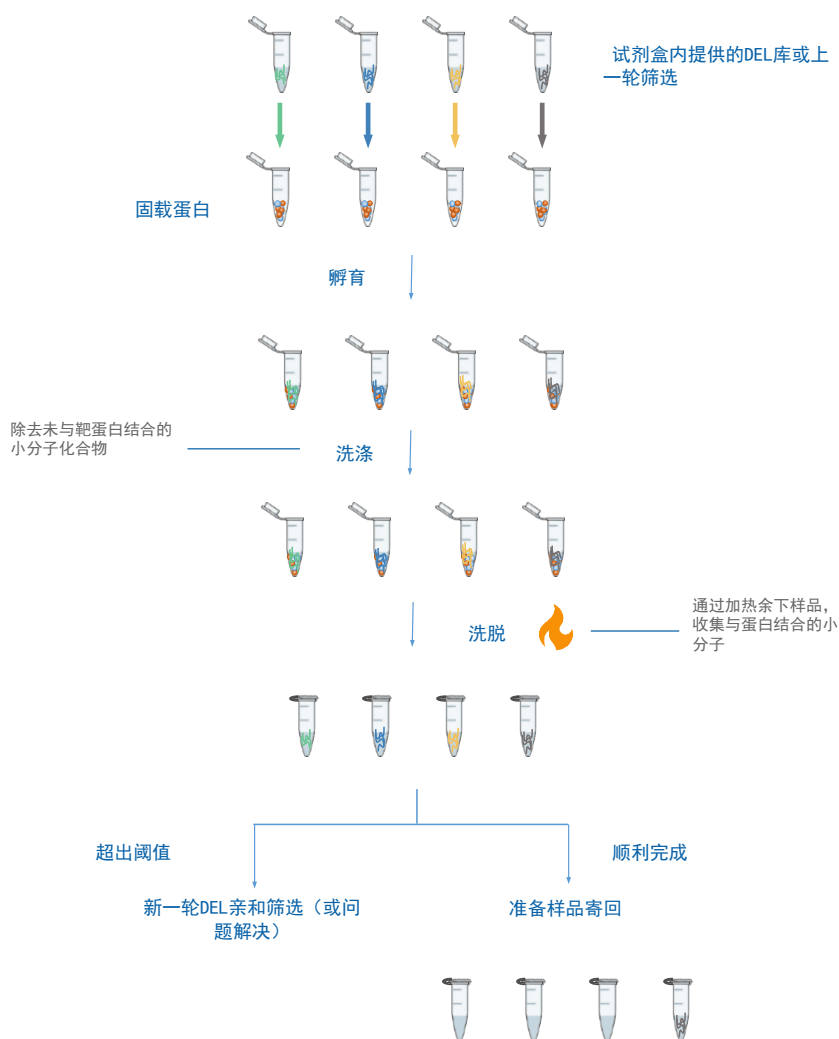
实验设备

- PCR仪
- 凝胶电泳及显影设备
- 微量离心管
- 旋转仪
- 加热器

亲和筛选&质量监控

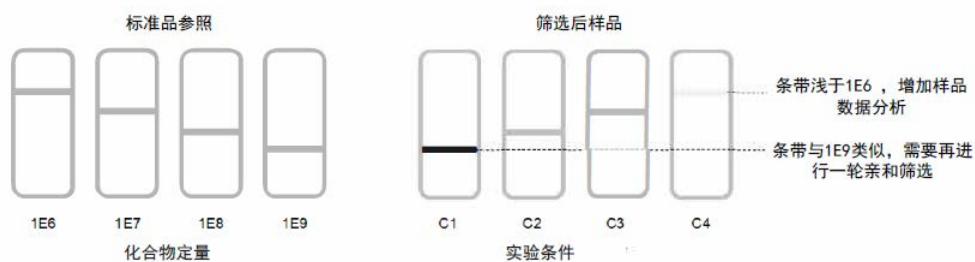
亲和筛选

通常需要 2-4 轮亲和筛选才能达到理想的DEL分子留存量。



筛选样品质量监控

通过PCR和凝胶电泳实验，进行自助式样品质量监控。



教学视频

[illegible]

请将样品全程于-80℃保存。

寄送包装中加入足量干冰，
寄送至离您最近的药明康德
HitS事业部实验室。
可选择：中国上海、美国波士顿或
德国慕尼黑

[Orders](#)
[Address Book](#)
[Support](#)
[Account](#)
[Sign Out](#)

Kit ID# 430000161

Sample ID# 523

Name:

Phone:

Address:

Institution/Corporation:

Order Placed: September 22 2020

Consulting

Shipping

Sample lock

Sample QC

Inspection report

NGS Data analysis

Final report

NGS/Data analysis
(Please wait / Analysis Result)

Inspection report
(Please wait / Download Inspection report)

Sample QC
The kit with this delivery number 131032702020enghighing (Logistics) has been arrived. Please wait for Sample QC result!



DELIGHT用户可以通过线上系统实时跟进项目进展。
网址：<https://hits.wuxiapptec.com>

qPCR Result

Sample ID	Purified Sample Volume(μL)	Molecule Count*	Sample Assessment Based on MC	ΔCt**	Sample Assessment Based on ΔCt
DEOpen DEMO_1	90	7.34E+07	Good	4.58	Good
DEOpen DEMO_2	90	7.87E+07	Good	5.19	Good
DEOpen DEMO_3	90	6.35E+07	Good	4.33	Good
DEOpen DEMO_4	90	3.76E+07	Good	5.00	Good

*Molecule Count (MC): The total number of DEL molecules after affinity selection

If **MC** is less than 1E+4, it means that the sample concentration is very low, which will probably result in insufficient data yield.

If ΔCt is more than 12, there is high risk of cross-contamination, it will probably result in insufficient data yield



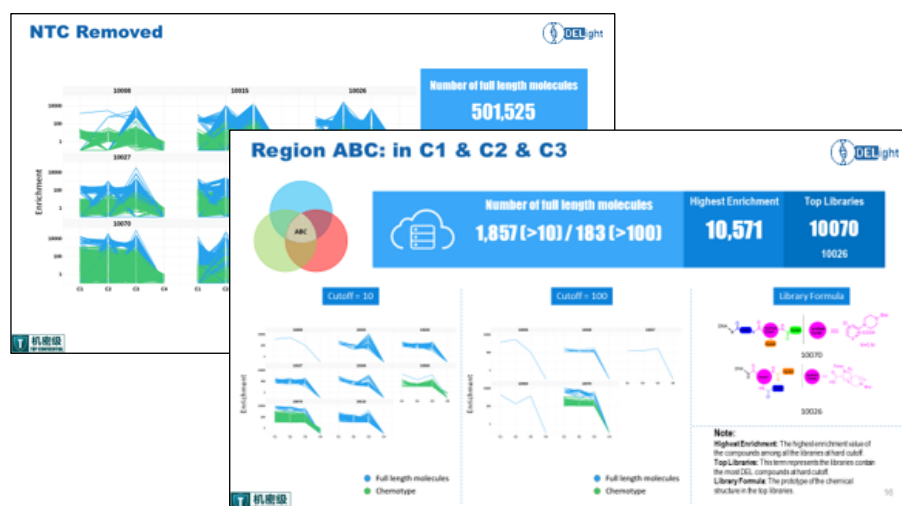
- 化合物留存量
- 样品污染评估

根据筛选后样品数据，
为用户提供样品质检报
告。

DELlight筛选数据解读

最终报告

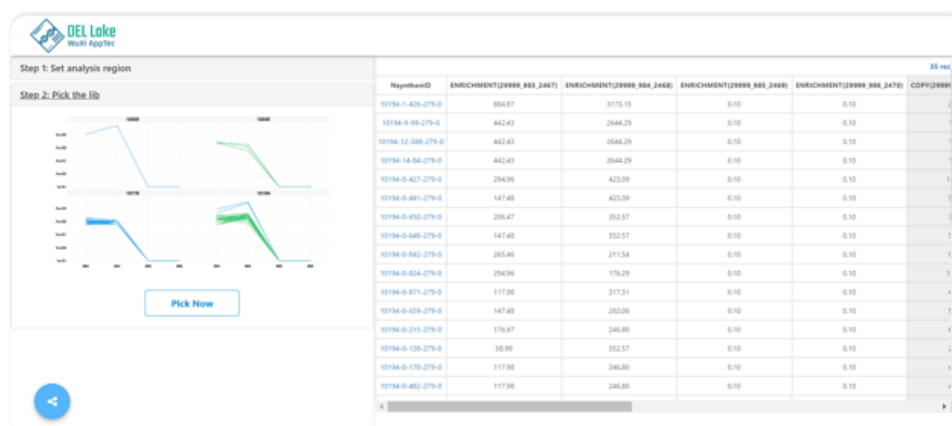
- 不同条件下化合物和化学类型的富集。
- 通过Motif分析，对可能存在的DNA偏向性结合进行预警。



交互式数据平台

线上数据平台，让用户直观了解分子的富集情况。

网址: <https://hits.wuxiapptec.com>



Set the cutoff for enrichment

condition	Func	enrichment
983_2467	>=	50
984_2468	>=	50
985_2469	<=	10

Close Save changes

- 定制化的数据分析

Please select a lib

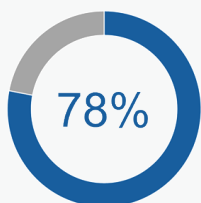
10178 Rank 1

10178 Rank 1

10194 Rank 2

- DEL库的定向检索

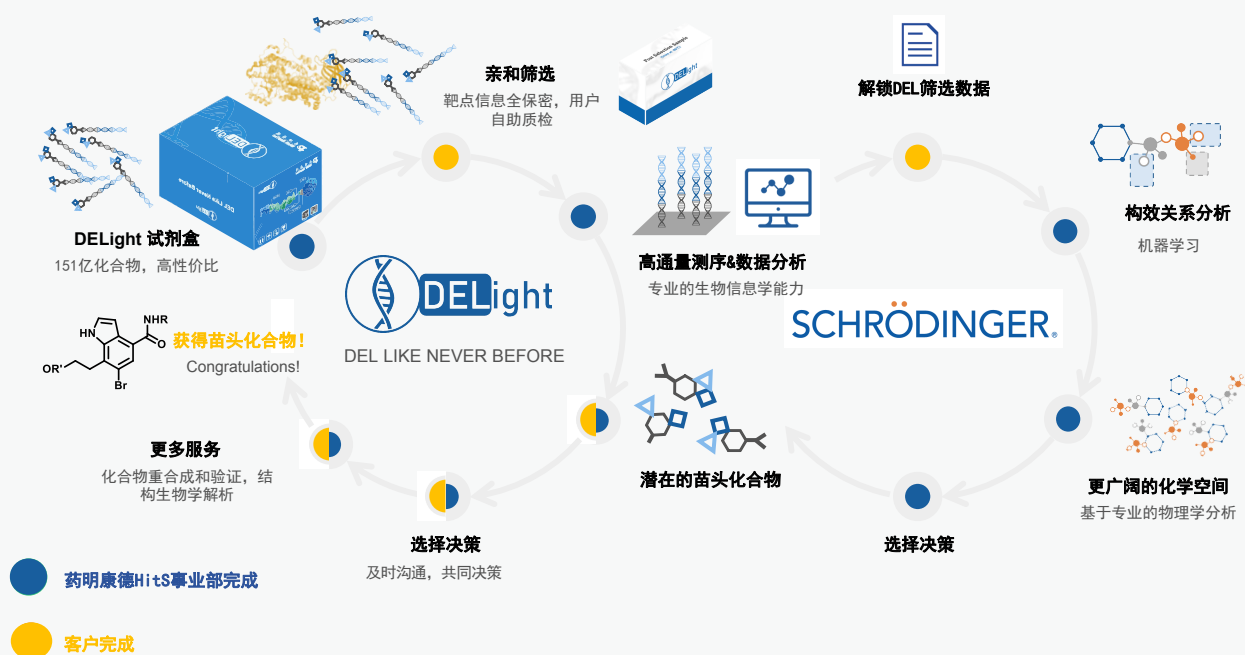
数据包&机器学习助力



DELlight数据包可实现海量数据交付，数据包兼容各类计算工具，如机器学习、AI辅助分析等。近78%的用户选择数据包解锁服务。

数据包包括：

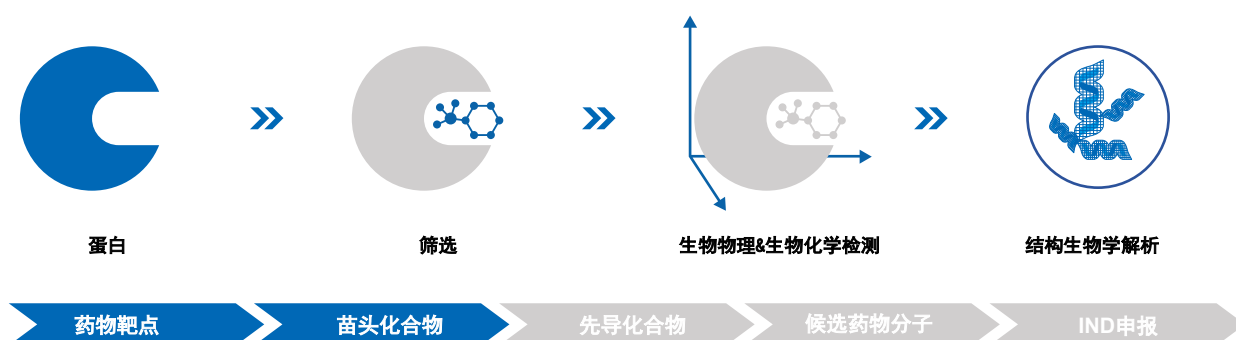
- 化合物的拷贝数和富集度评分
- 富集分子化学结构展示
- 分子物化属性的计算（如MW、LogP等）



药明康德HitS事业部推出机器学习服务，DELlight客户可选择与Schrodinger合作，探索更多化合物分子。

关于药明康德HitS事业部

药明康德HitS事业部，致力于为全球制药企业、生物技术公司和学术机构，提供优质高效的靶点到苗头化合物全流程技术服务。我们关注客户的核心诉求，坚持创新驱动发展，打造多元化服务模式，为客户提供优质且经济的个性化解决方案，赋能全球新药研发者。



服务范围涵盖蛋白科学、抗体科学、DNA编码化合物库技术、生物物理学、结构生物学研究等领域，药明康德HitS事业部致力于将领先的技术和个性化的服务带给全球新药研发工作者，早日实现“让天下没有难做的药，难治的病”的愿景。

 一站式定制服务 460亿+ 化合物 靶点排他性 面向所有用户 自主设计的分子骨架	 海量数据交付 151亿 化合物 无需透露靶点信息 面向所有用户 合作模式灵活，风险可控	 开源的DEL筛选服务 44亿 化合物 无需透露靶点信息 面向学术用户 数据共享
---	--	--

HitS官网: <https://hits.wuxiapptec.com>
 联系我们: DEL_service@wuxiapptec.com
 商务联系: 徐隆机
xu_longji@wuxiapptec.com
 18502100621





HitS微信公众号

联系我们: DEL_service@wuxiapptec.com