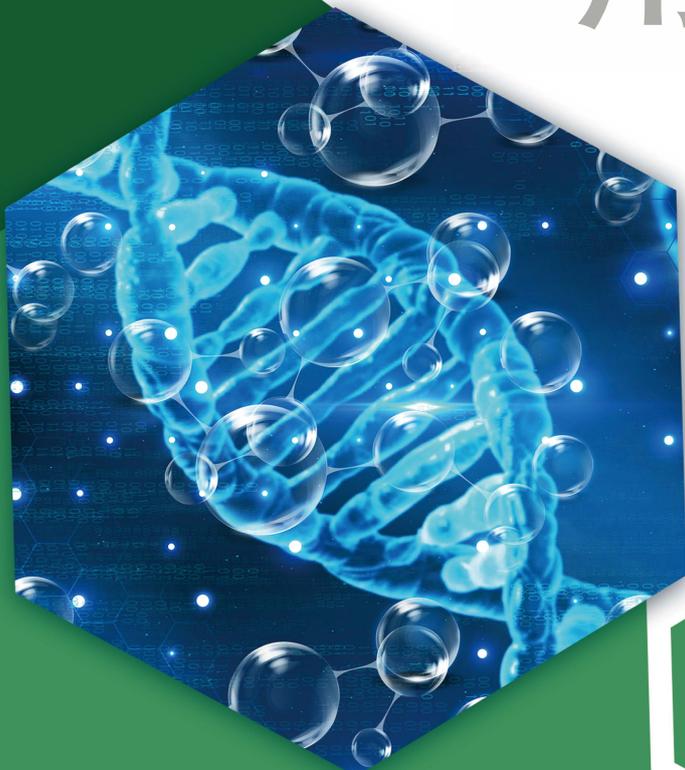


# DELOpen

## 用户手册



DELOpen 官网



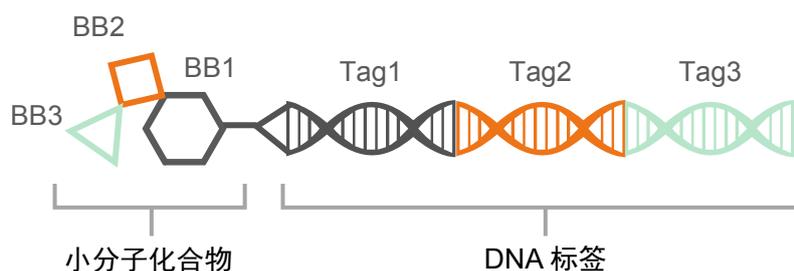
HitS 官网



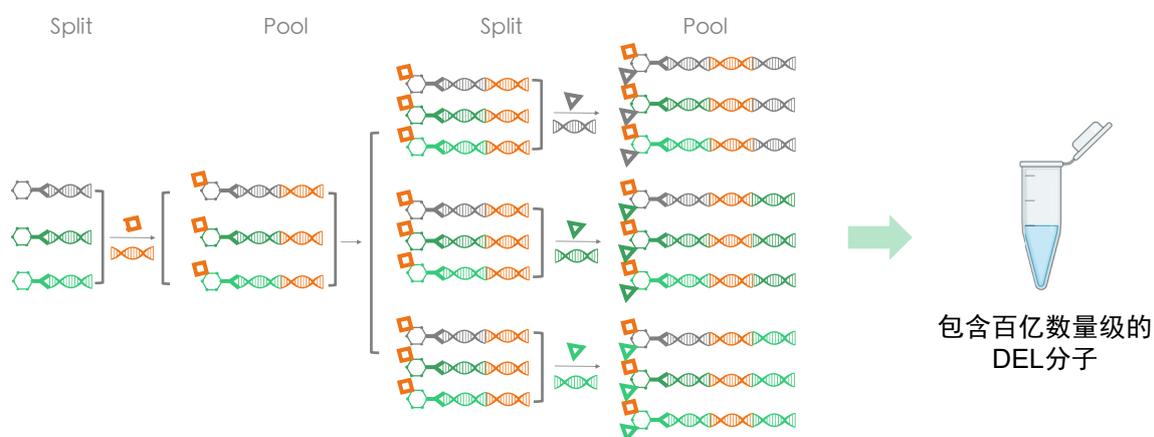
## 药物发现的新引擎

DNA 编码化合物库 (DEL) 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。

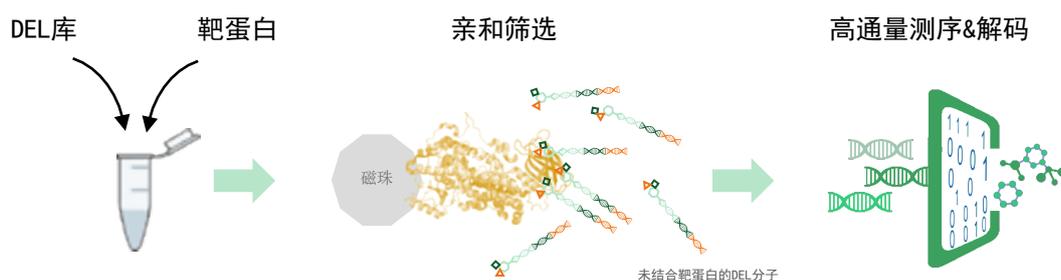
DEL分子示意图 (3循环)



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

为了实现“让DEL技术更开放”的目标，药明康德作为发起方，和高校联合推出了面向学术机构的DEL领域数据共享平台——DEOpen。



开源平台



数据共享

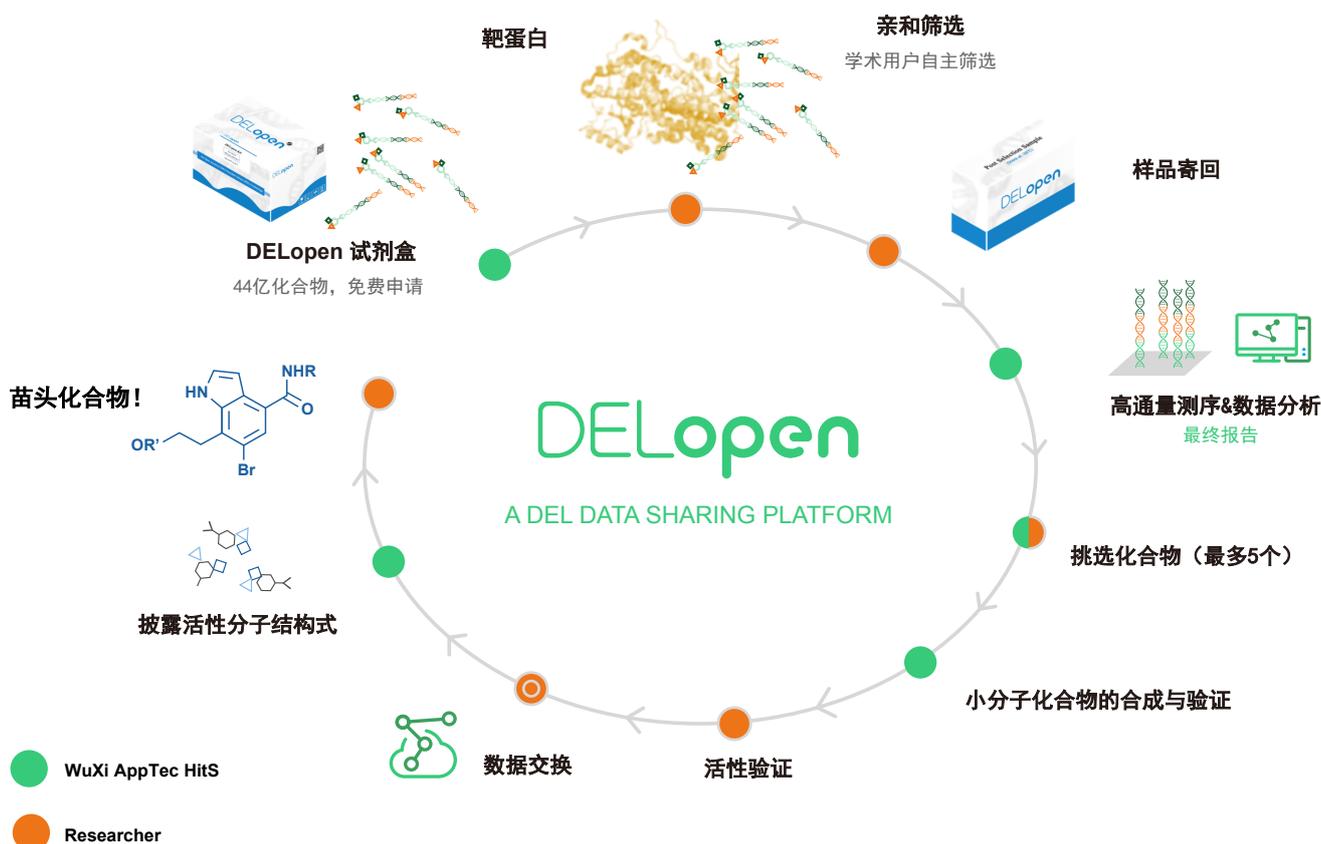


数据兼容性强



化学空间均衡

研究人员在收到DEOpen试剂盒后，可根据操作指南，进行亲和筛选，并将筛选后的样品寄送给药明康德HitS事业部。药明康德HitS事业部将对样品进行qPCR定量、PCR扩增、NGS（第二代测序）和数据分析等一系列样品处理流程。最后，研究人员会获得一份总结性的解读报告（不包括苗头化合物结构和DNA序列信息），并根据筛选结果决定是否进行下一步实验。如果挑选的化合物通过了活性验证，研究人员可以选择通过数据共享的方式获取化合物结构式。



## DEOpen科学顾问委员会

DEOpen科学顾问委员会由药明康德发起，联合全球顶尖学术研究人员共同成立，汇聚全球杰出专家的智慧 and 跨领域的洞见，进一步提升DNA编码化合物库技术在新药研发领域的应用广度和技术深度，助力全球新药研发。



*With the support provided in this partnership we aim to bridge academia and industry and jointly promote the application of DEL technology in the field of new drug discovery.*

— Richard Lerner

The Scientific Advisory Board chairman for DEOpen



**Roger Kornberg**  
Stanford University



**David R. Liu**  
Broad Institute



**Phil Baran**  
Scripps Research



**Carolyn Bertozzi**  
Stanford University



**Raymond Dwek**  
University of Oxford



**Chi-Huey Wong**  
Scripps Research



**Richard Soll**  
WuXi AppTec



**Martin Friedlander**  
Scripps Research



**Michael Kaplitt**  
Weill Cornell  
Medical College



**Casey J. Krusemark**  
Purdue University



**K. Barry Sharpless**  
Scripps Research



**Alan Saghatelian**  
Salk Institute



**Mark Yeager**  
University of Virginia  
School of Medicine

### 用户自述：



#### Jia Xie 博士

斯克利普斯研究中心客座研究员  
迈阿密大学助理教授

“我强烈建议有  
新药研发需求的  
科研工作者积极  
尝试DEOpen项目。  
同时，我由衷的  
希望DEOpen可以  
发展得越来越大、  
越来越好，从一  
个前所未有的角  
度，促进新药研  
发领域的基础研  
究和转化研究的  
发展。”



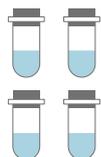
#### Erkan Baloglu 博士

波士顿生物技术咨询公司负责人

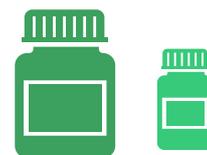
“DEOpen的筛选  
进程又快速又高  
效，DEOpen团队  
中两位经验丰富的  
专家全程参与我  
们的项目，为我  
们答疑解惑。”

## DEOpen产品服务内容

### DEOpen 试剂盒（免费）



- DEOpen库样品×4  
(30个DEL库, 44亿化合物)  
用于4个实验条件



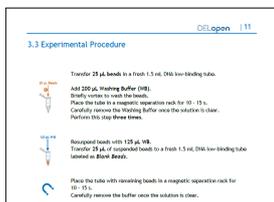
- Sheared salmon sperm DNA solution
- 10×PBS buffer (containing 0.5% Tween 20)  
用于制备洗脱缓冲液和筛选缓冲液



- 样品寄回管×12  
用于样品寄回



### 技术支持



操作手册-分步详解



筛选实验视频教程



教学实验室  
(苏州/波士顿/慕尼黑)

### 服务内容(免费)

样品处理	<ul style="list-style-type: none"> <li>▪ 样品定量—qPCR</li> <li>▪ 样品扩增—PCR</li> </ul>
高通量测序	<ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Illumina测序平台</li> </ul>
数据分析&在线平台	<ul style="list-style-type: none"> <li>▪ DNA序列解码</li> <li>▪ 数据标准化</li> <li>▪ 可视化线上数据平台</li> </ul>

### 服务内容 (共同承担费用)

DEOpen用户可在药明康德合成筛选数据中获得的小分子化合物。

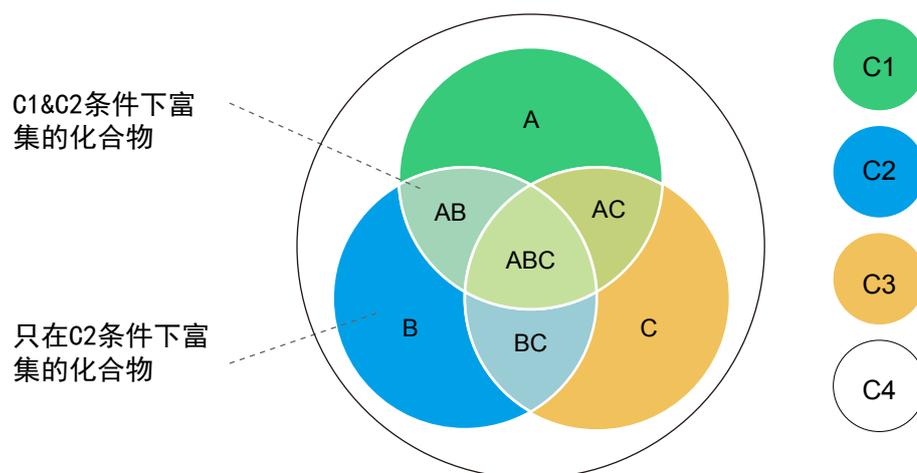
## DEOpen筛选前准备

## 实验设计

常见DEOpen筛选实验设计：

- 不同种类的蛋白样品
- 感兴趣的结构域或突变体
- 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&amp;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

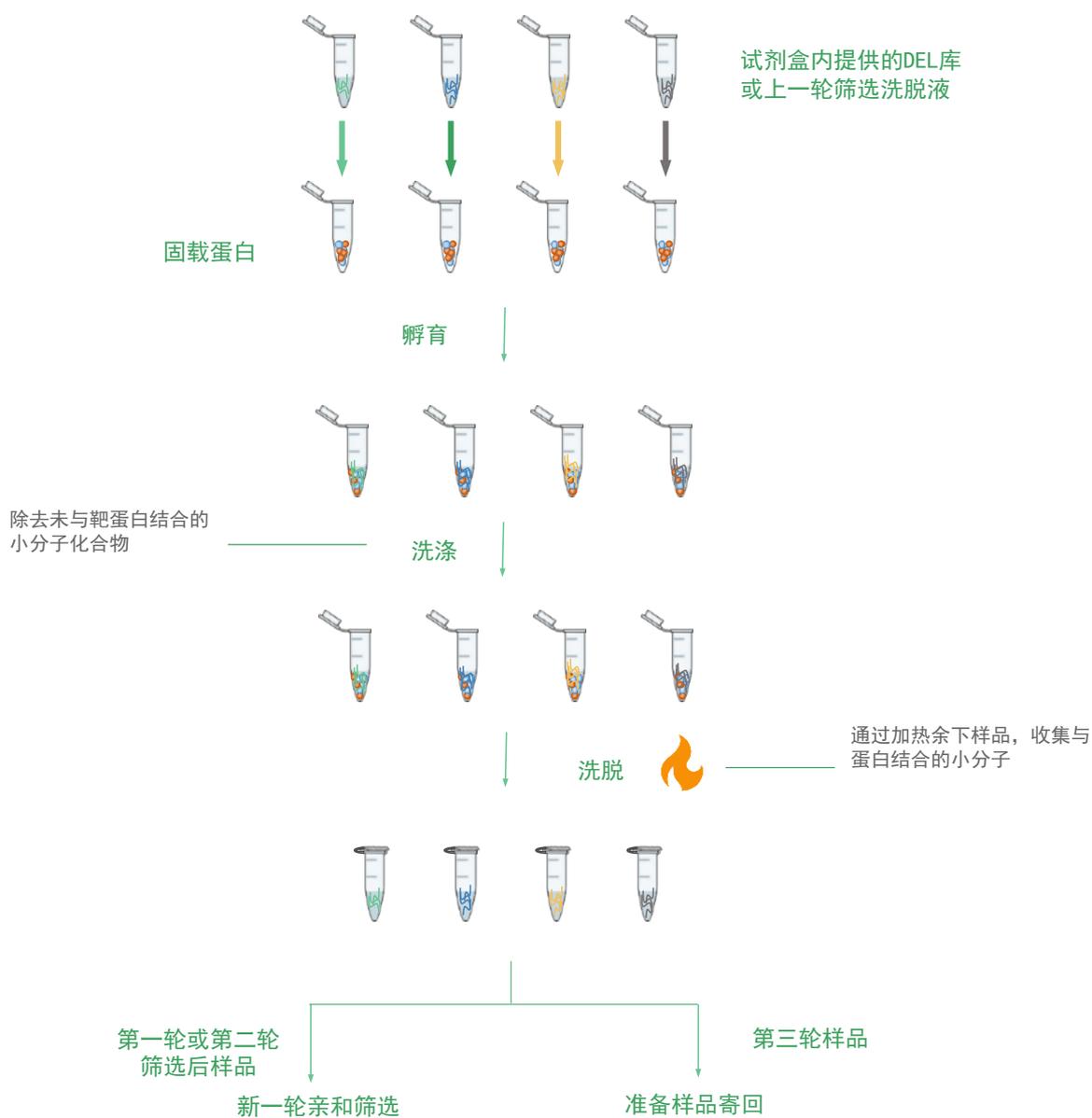
## 实验设备

- 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

通常需要3轮亲和筛选才能达到理想的DEL分子留存量。



视频教程

# 筛选实验结束后的步骤

## 样品寄回



填写样品信息表



请将样品全程于-80°C保存

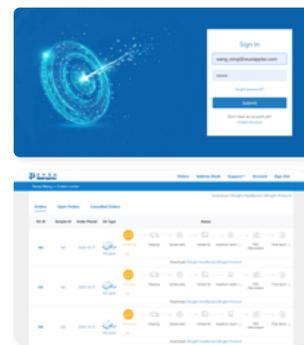
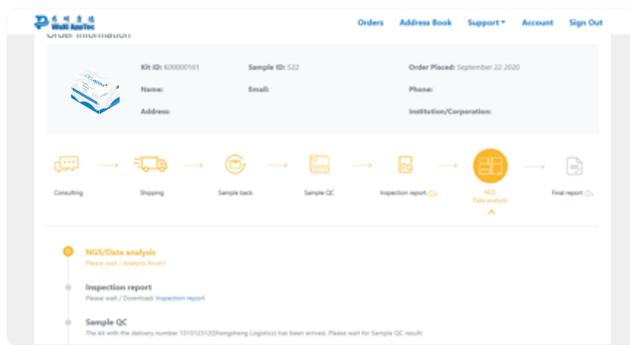


寄送包装中加入足量干冰，寄送至高您最近的药明康德HitS事业部实验室

可选择：中国上海、美国波士顿或德国慕尼黑

## 线上追踪

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



## 样品质检报告

根据筛选后样品数据，为用户提供样品质检报告。

### 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  
\*\*ΔCt = Ct<sub>target</sub> - Ct<sub>reference</sub>



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.

DEOpen

- DEL化合物留存量
- 样品污染评估

# DEOpen筛选数据解读

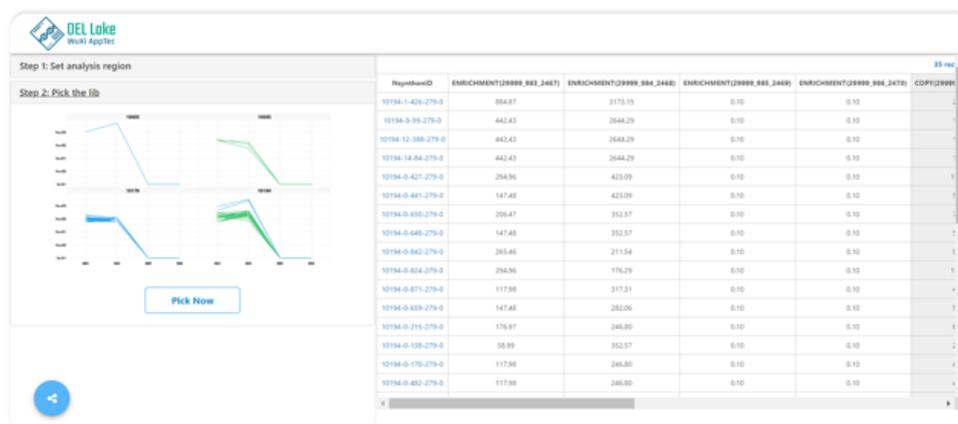
## 最终报告

- 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

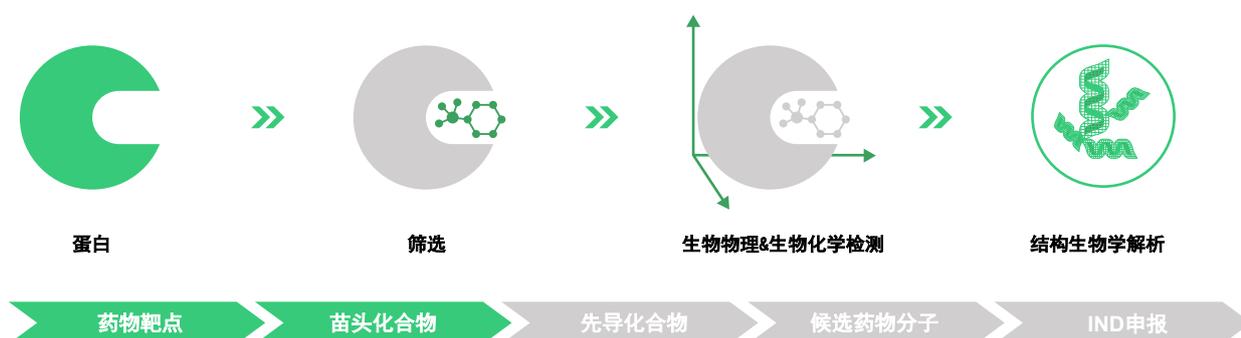
10194 Rank 2

- DEL库的定向检索



## 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。

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

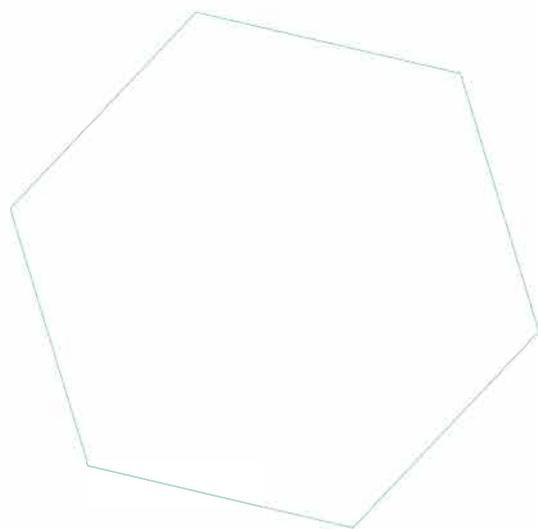
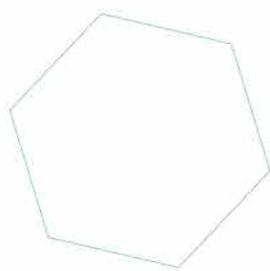
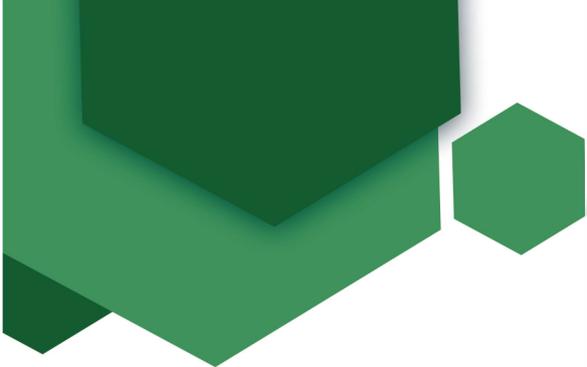
扫码获取DEOpen试剂盒免费申请手册！

商务负责人  
徐隆机

联系电话：18502100621

邮箱：xu\_longji@wuxiapptec.com





HitS事业部公众号

在DEOpen官网免费申请DEOpen试剂盒：

<https://www.delopen.org>

更多服务及产品，请访问官网：

<https://hits.wuxiapptec.com>