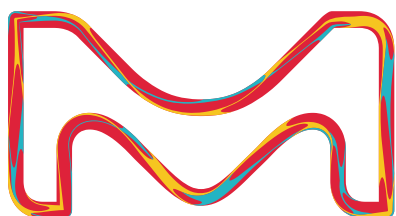


DNA-encoded Library

創薬スクリーニングの新手法



The life science
business of Merck
operates as
MilliporeSigma in
the U.S. and Canada.

Sigma-Aldrich®
Lab & Production Materials

DNA-encoded library

創薬スクリーニングの新手法

DNA-encoded library (DEL) は、ハイスループットスクリーニング (HTS) に代わってヒット化合物を効率的に発見するための新しいアプローチです¹⁾。

ライブラリーの各化合物にバーコードとなる特異的なDNAがタグづけされており、ひとつのバイアルで一度にスクリーニングを実施できます。標的タンパク質との相互作用で結合したフラグメント化合物は、単離してバーコードを切り出した後に、PCRで増幅したDNA配列から化学構造を同定します。その後、標的タンパク質に対する活性評価試験を行います。

DyNAbind社DEL

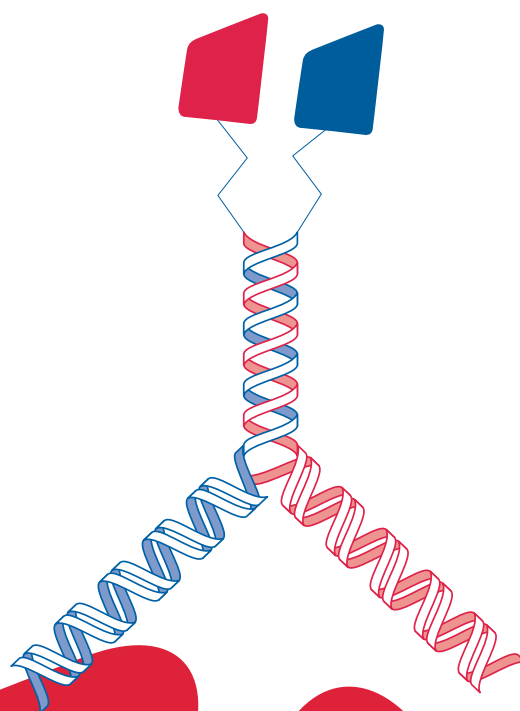
現在、様々なDELが利用可能になっていますが、その多くは高額な委託契約を必要とします。Sigma-Aldrichでは、アカデミアを含む多くの創薬研究者がDELの技術を広く活用できるよう、DyNAbind社のフラグメントライブラリーをすぐに使える ready-to-useのキットとして提供しています²⁾。特別な設備やアウトソーシングは不要です。弊社のカatalog製品と同様にご注文ください。

キットには、DyNAbind社独自のダイナミック フラグメント ライブラリーからRule-of-3に基づき厳選された614種のフラグメントが含まれており、37万のフラグメントペアをスクリーニングできます。各フラグメントは、結果の信頼性を高めるよう、すべてHPLCで精製され質量分析で確認を行っています。

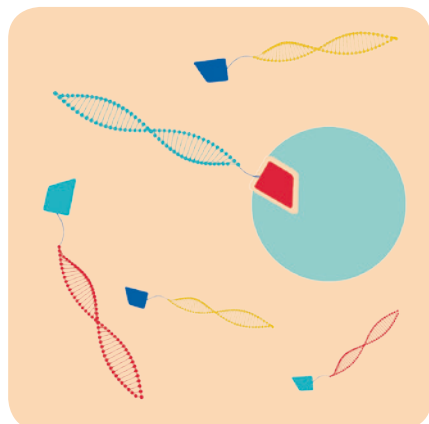
より迅速かつ高効率で、しかも経済的なDyNAbind社のDELを皆様の創薬研究に是非ご活用ください。

特長

- 迅速かつ安価に入手可能
- S/N比を改善するダイナミック フラグメント ライブラリー
- 高純度のフラグメント化合物により結果の信頼性と再現性を最大化
- 最適化やリード展開に好適なRule-of-3 に基づくフラグメントライブラリー設計³⁾
- 本格的にDELを導入・委託する前の初期評価にも有用
- 多くのdruggableなターゲットに結合する十分な多様性

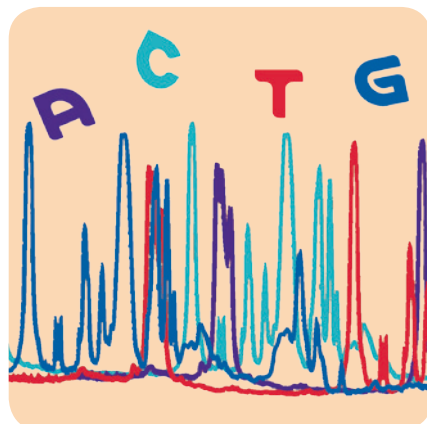


DyNABind DEL のワークフロー



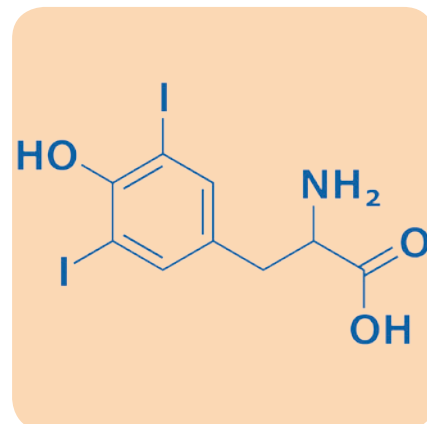
Screen

- 固定化した標的タンパク質にフラグメント化合物を結合させる



Sequence

- ダイマーのライゲーションを行う
- 結合した化合物に固有のタグをPCRで増幅する
- NGSでDNA配列を解析する

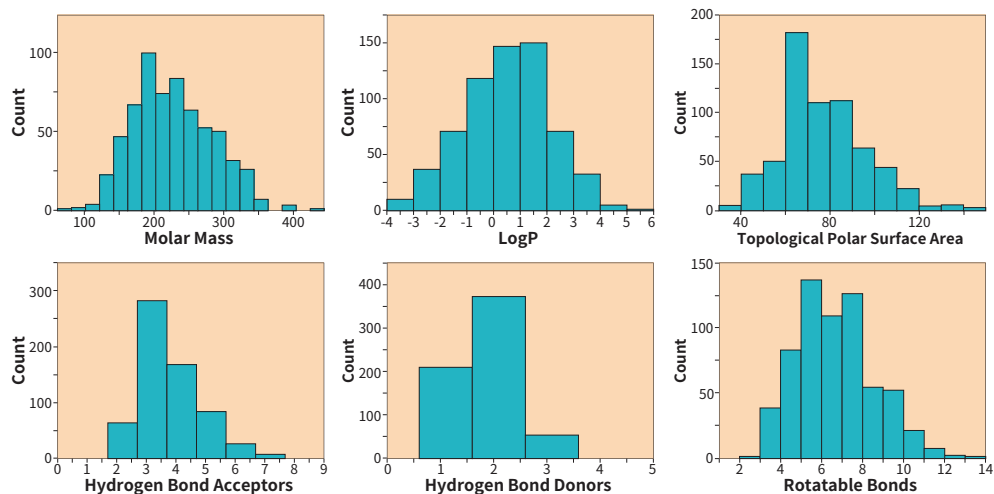


Identify

- SigmaAldrich.com/DELanalysisでDNA配列からヒット化合物を確認する

ライブラリーの構成

Rule-of-3を基に、DyNABind社が厳選した多様性のある614種のフラグメント化合物で構成されています。擬陽性リスクが高いとされる化合物 (PAINS) や毒性化合物は除外してあります。



Rule-of-3: MW <300, H-bond donors ≤3, H-bond acceptors ≤3, ClogP ≤3
Average Tanimoto Similarity: 0.195

製品名

DyNABind™ DNA-Encoded Fragment Library
(凍結乾燥品、5バイアル入り)

カタログ番号

DYNA001-1EA

DyNABind 社のDELの詳細、プロトコールはWebサイトをご覧ください。
SigmaAldrich.com/DEL-jp

References

1. Satz, A.L. *ACS Med. Chem. Lett.* **2018**, 9(5), 408
2. Reddavid, F.V.; Lin, W.; Lehnert, S.; Zhang Y. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2015**, 54, 7924
3. Congreve, M.; Carr, R.; Murray, C.; Jhoti, H. *Drug Discovery Today* **2003**, 8, 876

The use of this DyNABind Product (the "Product") is covered by European Patents EP 3 094 745 B1 and EP 3 169 832 B1 and corresponding applications pending in the US, Canada, and Japan. Purchaser is granted the right to use the Product for its internal research use only. This limited use label license does not grant the purchaser any right to use resulting fragments or products in commercial products or services. For information on commercial rights, please contact the outlicensing department at licensing@dynabind.com.

DNA-encoded Library 関連製品

スクリーニング結果の信頼性を高めるために、高品質の試薬・プライマーをお薦めします。

プロトコル掲載製品	カタログ番号	製品名	希望販売価格
1a) Selection with the DEL using a His-tag protein			
TWEEN-20	P9416-50ML	TWEEN® 20	¥2,960
Imidazole	I5513-5G	Imidazole	¥10,900
Magnetic beads	LSKMAGH02	PureProteome ニッケル磁気ビーズシステム, 2mL	¥23,400
	LSKMAGH10	PureProteome ニッケル磁気ビーズシステム, 10mL	¥79,400
Magnetic rack	LSKMAGS08	PureProteome 磁気スタンド	¥49,800
T4 DNA ligase	D2886-100UN	T4 DNA Ligase, 100 U	¥15,700
ATP	A6559-25UMO	ATP, Lithium salt	¥22,300
Klenow	D8276-50UN	DNA Polymerase I, Klenow Fragment from Escherichia coli	¥23,300
dNTPs	DNTP100-1KT	Deoxynucleotide Set, 100 mM	¥75,100
Hisタンパク質発現系		各種取扱いございます。Webをご覧ください。	
1b) Selection with the DEL using a biotinylated protein			
TWEEN-20	P9416-50ML	TWEEN® 20	¥2,960
D-biotin	8.51209.0001	D(+)-Biotin	¥5,070
Herring sperm DNA	D7290-1ML	Deoxyribonucleic acid from herring sperm	¥9,960
Biotin-タンパク質	11418165001	Biotin Protein Labeling Kit	¥49,600
Streptavidin sepharose beads	LSKMAGT02	PureProteome™ Streptavidin Magnetic Bead System, 2 x 1mL	¥41,400
	LSKMAGT10	PureProteome™ Streptavidin Magnetic Bead System, 10mL	¥140,000
Magnetic rack	LSKMAGS08	PureProteome 磁気スタンド	¥49,800
T4 DNA ligase	D2886-100UN	T4 DNA Ligase, 100	¥15,700
ATP	A6559-25UMO	ATP, Lithium salt	¥22,300
Klenow	D8276-50UN	DNA Polymerase I, Klenow Fragment from Escherichia coli	¥23,300
dNTPs	DNTP100-1KT	Deoxynucleotide Set, 100 mM	¥75,100
2) Realtime PCR			
qPCR Master mix	S4438-20RXN	SYBR®Green JumpStart™TaqReadyMix™	¥7,630
Nuclease-free water	W1754-1VL	Water PCR Reagent	¥6,620
3) Preparative PCR 1			
High Fidelity Polymerase	4743725001	Expand™ High FidelityPLUS PCR System, dNTPPack (≤125 reactions)	¥10,300
4) Agarose Gel Electrophoresis			
アガロースゲル	A4718-25G	Agarose	¥31,200
	A4718-100G	Agarose	¥70,500
分子量マーカー	D3687-1VL	DirectLoad™ PCR 100 bp Low Ladder	¥18,500
5) Agarose Gel Purification			
ゲル抽出キット	56500-70EA	GenElute™ Agarose Spin Columns	¥21,300

プロトコル、試薬、価格、その他詳細は、webサイト SigmaAldrich.com/DEL-jp をご覧ください。

*各販売会社へご注文ください。

【製品の技術的なお問い合わせ (テクニカルサービス)】

<メルク製品> TEL: 03-4531-1140

<シグマ製品> TEL: 03-6756-8245

<カスタム製品> TEL: 03-6756-8260

FAX: 03-5434-4859

FAX: 03-6756-8302

FAX: 03-6756-8306

Email: jpts@merckgroup.com

Email: jpts@merckgroup.com

Email: customjp.ts@sial.com



メルク公式アカウント
友だち追加は
コチラ



サイエンス系
お役立ちメディア
M-hub



かんたんカタログ検索
カタログ
ファインダー



メルク ライフサイエンス公式Facebookページ
メルク ライフサイエンス Merckで検索



メルク ライフサイエンス公式Twitterアカウント
メルク ライフサイエンス Merckで検索



メルク ライフサイエンスメールニュース
www.merckmillipore.jp/wm

本紙記載の製品は試験・研究用です。ヒト、動物への治療、もしくは診断目的として使用しないようご注意ください。掲載価格は希望販売価格 (税別) です。実際の価格は弊社製品取扱販売店へご確認ください。なお、品目、製品情報、価格等は予告なく変更される場合がございます。予めご了承ください。記載内容は2019年9月時点の情報です。Merck, the vibrant M, and Sigma-Aldrich are trademarks of Merck KGaA, Darmstadt, Germany or its affiliates. All other trademarks are the property of their respective owners. Detailed information on trademarks is available via publicly accessible resources. ©2020 Merck KGaA, Darmstadt, Germany. All rights reserved.

シグマ アルドリッチ ジャパン リサーチ事業部

〒153-8927 東京都目黒区下目黒 1-8-1 アルコタワー 5F

製品の最新情報はこちら www.sigma-aldrich.com/japan

製品に関するお問い合わせは、テクニカルサービスへ

E-mail: jpts@merckgroup.com Tel: 03-6756-8245 Fax: 03-6756-8302

在庫照会・ご注文に関するお問い合わせは、カスタマーサービスへ

E-mail: sialjpcs@merckgroup.com Tel: 03-6756-8275 Fax: 03-6756-8301

シグマ アルドリッチ ジャパン合同会社はメルクのグループ会社です。

CHM046A-2003-0.3K-E