

2019 年创腾科技生命科学分子模拟课程

应用 Discovery Studio 进行抗体理性设计

培训相关信息如下：

培训时间：2019 年 9 月 25-27 日，共三天

培训地点：苏州创腾科技培训中心（江苏省苏州市工业园区东长路 88 号 2.5 产业园 A2 栋 301 室）

一、培训主旨

抗体药物作为生物药物的主力军，以其高特异性、有效性和安全性正在发展成为国际药品市场上一大类新型诊断和治疗药物，日益成为许多重要疾病（癌症、慢性炎症疾病、心血管疾病、免疫系统疾病等）治疗市场的新宠。而分子模拟技术在近 20 年内已两次荣登诺贝尔化学奖的奖台，成为生命科学领域认识和解决复杂的科学和工程问题的重要方法。借助分子模拟技术进行抗体药的理性设计已成为未来治疗性抗体研发新趋势，其重要作用也越来越多的得到体现。Discovery Studio 作为面向生命科学领域的分子模拟与分子设计软件，不仅可以为抗体研发者们提供一个易于操作使用的抗体建模环境，而且还可以以抗体结构作为起点，优化抗体作为治疗性药物的疗效和药物可发展性，从而助力抗体新药研发，提高抗体成药性，加速抗体研发周期，降低研发成本。本次培训班旨在帮助学员系统了解、掌握如何应用 Discovery Studio 进行抗体理性设计并快速上机操作。

二、培训对象

从事抗体药物或其它抗体相关研发领域的科研工作者，以及有兴趣想要借助 Discovery Studio 分子模拟平台来开展抗体理性设计工作并能快速上机模拟操作的相关人员。

三、培训内容

本次培训主要以 Discovery Studio 软件为依托，详细介绍 DS 在抗体理性设计领域提供的一系列完美解决方案与上机操作，内容包括：

- 抗体序列的注释：抗体重链及轻链可变区、恒定区、CDR 区的注释，抗体 Gemline 基因的识别；
- 抗体序列的分析：抗体翻译后修饰位点的预测（如糖基化位点等），抗原线性表位预测；
- 抗体结构的预测与优化，全长抗体、抗体 Fab 区、scFv 结构的预测；
- 抗体-抗原相互作用的预测，抗原构象表位的识别；
- 抗体分子的设计与改造：抗体亲和力成熟，抗体稳定性优化，双特异性抗体设计，抗体聚集效应分析，抗体人源化改造。

四、培训形式

- 1、通过文献案例分析讲解抗体理性设计策略，以及相应功能模块的原理介绍；
- 2、上机操作：讲解抗体理性设计过程中每一步骤的具体操作流程及参数设置（提供完整的培训教程）；
- 3、学员交流与讨论，工程师进行现场答疑。



五、培训费用

培训费用	1 人参加	特惠价格及条件（符合任一条件即可）： 1、9月10日前成功报名并汇款； 2、同一单位，≥2人参加； 3、同一学员（2011年至今）曾参加过DS培训课程。
学术客户	3600/人	3000/人
企业客户	5400/人	4800/人

注：1、培训费包含听课费、资料费、上机费、午餐。住宿和交通费自理。

2、发票为电子发票，学员缴费后现场扫码填写发票信息，发票将发送到学员邮箱，发票内容为“**培训费**”或“**会议费**”。

3、本次培训不提供增值税专用发票，统一开增值税普通发票。

六、报名方式

• **报名方式**：登录创腾学院官网 <http://training.neotrident.com/> 在线提交或下载**报名回执**。名额有限，报名从速，额满为止。

• **付费方式**：

a、银行汇款（请在汇款时务必备注参加人员姓名）

户 名：苏州创腾数据科技有限公司（行号：308305008189）

开户行：招商银行苏州分行营业部

账 户：512907942610802

b、现金支付：培训现场可收取现金或刷卡。

七、交通地图

培训地址：

南门地址：江苏省苏州市工业园区东长路 88 号 A2 栋 301 室

西门地址：江苏省苏州市工业园区方中街东 50 米星巴克旁 A2 栋 301 室

【注：建议学员从西门进，离 A2 栋 301 室培训教室较近。】





交通路线参考：

• 苏州园区火车站

- 1、【沪宁城际园区站广场站】上车坐 258 路（星湖首末站北方向），【星湖立交南站】下车，换乘快线 7 号（凤凰城首末站南方向），【凤凰城首末站】下车，步行 350 米到。全程约 1 小时。
- 2、打车最短距离约 11 公里，费用约 30 元。

• 苏州站

- 1、地铁 4 号线（同里方向）【苏州火车站】上车，【乐桥站】下车换乘地铁 1 号线（钟南街方向），至【南施街站】下车 1 号口出，【园区城管大厦站】上快线 7 号路（凤凰城首末站方向），【凤凰城周末站】下车，步行 350 米到。全程约 1 小时 10 分钟。
- 2、打车最短距离约 21 公里，费用约 55 元。

• 苏州北站

- 1、【京沪高铁苏州北站】乘坐快线 7 号（凤凰城首末站方向），【凤凰城首末站】下车，步行 350 米到达，全程约 1 小时 30 分钟。
- 2、打车最短距离约 22 公里，费用约 60 元。

八、周边住宿(请学员自行预定，费用自理)

- 1) 宾馆名称：桔子酒店（精选） 0512-62628333（最近）
宾馆地址：江苏省苏州市吴中区港田路南 70 米文化人才公寓 9 楼

注：本酒店为创腾学院协议酒店，预定时说明是参加创腾培训即可享受协议价格。



- 2) 宾馆名称：汉庭酒店(苏州凤凰新天地店) 0512-62805388
宾馆地址：苏州工业园区南榭雨街 9 号凤凰新天地商业二期 41 幢 103 号
- 3) 宾馆名称：苏州东沙湖邻里商务酒店 0512-67997868
宾馆地址：苏州工业园区东沙湖路 100 号
- 4) 宾馆名称：宜必思酒店(苏州工业园区中心酒店) 0512-81879966
宾馆地址：江苏苏州市苏州大道东 292 号(地铁 1 号线南施街站 4 号出口处)

注：以上四个经济型酒店供学员参考。周边住宿非常紧张，提醒学员提早预定住宿。

九、培训班联系人

创腾科技有限公司 市场部

电话：0512-67509707 (转 220) (叶小姐)，

021-51821768-233 (陈小姐)，13916858963

Email：market@neotrident.com

培训网站：<http://training.neotrident.com/>



附：培训班日程安排。



日期	时间	内容
第一天	08:30-09:00	报到和注册 报到地点：苏州创腾培训中心
	09:00-10:30	Discovery Studio 基本界面 DS 背景介绍，DS 界面介绍，DS 入门操作， 抗体、抗原分子的预处理方法介绍与实际操作
	10:30-10:45	茶歇
	10:45-11:45	抗体理性设计概述 抗体理性设计专题之一：抗体序列的分析 基于抗体序列注释抗体结构域和 CDR loop 区，识别 Gemline 基因，预测 PTM 翻译后修饰位点、抗原线性表位。
	11:45-13:30	午餐
	13:30-15:00	抗体理性设计专题之二：抗体结构的预测及优化 抗体 Fab 区、Fv 区、scFv、全长结构及双特异性抗体结构的构建，CDR 区的 优化，抗体人源化改造策略，基本原理介绍及案例分析
	15:00-15:15	茶歇
	15:15-16:30	抗体理性设计专题之二：抗体结构的预测及优化 抗体建模参数设置、实际操作技巧及结果分析
	16:30-17:00	课程讨论及答疑
第二天	09:00-10:30	抗体理性设计专题之三：抗体-半抗原相互作用预测(CDOCKER) 抗体-半抗原结合模式的确定，结合位点关键作用氨基酸的分析与确定， 基本原理介绍、案例分析
	10:30-10:45	茶歇
	10:45-11:45	抗体理性设计专题之三：抗体-半抗原相互作用预测(CDOCKER) 参数设置、实际操作技巧及结果分析
	11:45-13:30	午餐
	13:30-15:00	抗体理性设计专题之三：抗体-半抗原相互作用预测(Flexible Docking) 抗体-半抗原结合模式的确定，结合位点关键作用氨基酸的分析与确定， 基本原理介绍、参数设置及结果分析
	15:00-15:15	茶歇



第三天	15:15-16:00	抗体理性设计专题之四：抗体结构动态模拟(分子动力学模拟) MD 基本原理，溶剂模型的添加，束缚条件的设定，平衡状态的判定等，半抗原连接位点的判定。
	16:00-16:30	抗体理性设计专题之四：抗体结构动态模拟(分子动力学模拟) 参数设置、实际操作技巧及结果分析
	16:30-17:00	课程讨论及答疑
	09:00-10:30	抗体理性设计专题之五：抗体-抗原相互作用预测 (ZDOCK) 抗体、抗原结合模式的确定，结合表面关键残基的分析，抗原表位的识别。 基本原理介绍及案例分析、参数设置、实际操作技巧及结果分析。
	10:30-10:45	茶歇
	10:45-11:45	抗体理性设计专题之六：抗体亲和力成熟 (虚拟氨基酸突变扫描) 虚拟氨基酸扫描突变，识别能够优化抗体结合亲和力的突变位点，pH 和温度等环境因素的考虑，原理介绍、参数设置、实际操作技巧及结果分析
	11:45-13:30	午餐
	13:30-14:00	抗体理性设计专题之七：抗体稳定性优化 (虚拟氨基酸突变扫描) 虚拟氨基酸扫描突变，搜索能够稳定抗体结构的突变位点，原理介绍、参数设置、实际操作技巧及结果分析
	14:00-15:15	抗体理性设计专题之七：抗体稳定性优化 (抗体聚集效应的预测) 识别抗体结构中易于聚集的位点以进行突变优化，以抗体聚集效应作为指标评价抗体的稳定性和可发展性以筛选在研抗体， 基本原理介绍、参数设置、实际操作技巧及结果分析
	15:15-15:30	茶歇
	15:30-16:30	抗体理性设计专题之八：抗体人源化 抗体人源化位点信息和回复突变位点信息的预测，原理介绍、参数设置、实际操作技巧及结果分析
	16:30-17:00	课程讨论及答疑

