

2019 年创腾科技生命科学分子模拟课程

分子模拟技术在酶工程与酶设计的应用

培训相关信息如下：

培训时间：2019 年 12 月 11-13 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

本次培训班旨在帮助学员快速了解并掌握 Discovery Studio 中有关酶的理性设计的各模拟技术的核心原理、参数设置技巧、结果分析、热点问题的解决并快速上机操作，能够将各模拟方法灵活应用到实际的酶领域相关研究课题中，学以致用，解决实际的应用问题。具体包括：

- 从分子水平分析、预测并优化酶结构
- 从分子水平预测并解释酶-底物的作用机制
- 基于理性设计方法改造并优化酶结构
- 分析可能的突变位点以提高酶的稳定性、同底物的亲和力等

二、培训对象

没有或只有少量模拟研究经验，或刚开始使用 Discovery Studio 软件、希望进一步系统掌握软件使用技巧、能够快速上机模拟操作相关课题的酶研究领域人员。

三、培训内容

本次培训以 **Discovery Studio 软件** 的基础操作和应用为核心，以**酶的理性设计**为基础，针对酶的理性设计中所涉及的技术进行介绍与上机操作，包括：基于酶的一级序列预测翻译后修饰位点和酶的三维结构、酶-底物相互作用预测及优化、通过虚拟氨基酸突变设计同底物亲和力更高的酶或稳定性更高的酶、预测并引入新的二硫键提高酶的稳定性、预测酶结构表面易聚集的位点并进行突变优化、采用分子动力学分析酶的构象变化等等。

四、培训形式

- 通过文献案例分析讲解酶理性设计策略，以及相应功能模块的原理介绍；
- 上机操作：讲解酶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）；
- 学员交流与讨论，工程师进行现场答疑答疑。

五、培训费用



注册类型	注册费用	特惠费用及条件（符合任一条件）：
		1、 11月20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

1、**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。

2、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

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、【沪宁城铁园区站广场站】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
	09:00-10:15	Discovery Studio 基本界面 DS 背景介绍，DS 界面介绍，蛋白与小分子的预处理方法介绍与实际操作。
	10:15-10:30	茶歇
	10:30-11:45	酶的理性设计概述 酶的理性设计专题之一：酶的序列分析 酶序列的分析，如进化分析、翻译后修饰位点的预测等，应用与操作。 酶的理性设计专题之二：酶结构的构建 同源建模核心原理介绍及案例分析，同源模板的选取技巧、同源模型的优化与评价等。
	11:45-13:30	午餐
	13:30-15:00	酶的理性设计专题之二：酶结构的构建 同源建模参数设置意义、实际操作技巧及结果分析。
	15:00-15:15	茶歇
	15:15-16:30	酶的理性设计专题之三：酶与小分子底物相互作用机理研究(CDOCKER) 分子对接的核心与原理，酶催化位点的定义，酶-底物最终作用模式的选取与分析，关键氨基酸位点的识别与显示方法，CDOCKER 基本原理及案例分析。
	16:30-17:15	课程讨论及答疑
第二天	09:00-10:15	酶的理性设计专题之三：酶与小分子底物相互作用机理研究(CDOCKER) CDOCKER 参数设置意义、实际操作技巧及结果分析。
	10:15-10:30	茶歇
	10:30-11:45	酶的理性设计专题之三：酶与小分子底物相互作用机理研究(Flexible Docking) 对接过程中蛋白分子柔性的考虑方法，Flexible Docking 基本原理介绍、案例分析； 参数设置意义、Flexible Docking 实际操作技巧及结果分析。
	11:45-13:30	午餐
	13:30-14:45	酶的理性设计专题之三：酶与蛋白底物相互作用机理研究 (ZDOCK) 蛋白-蛋白对接，结合位点、结合模式的确定，结合表面关键残基的分析，ZDOCK 基本原理介绍、案例分析，参数设置意义、实际操作技巧及结果分析。
	14:45-15:00	茶歇



	15:00-16:30	酶的理性设计专题之三：酶与底物相互作用机理研究(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； MD 参数设置意义、实际操作技巧及结果分析。
	16:30-17:15	课程讨论及答疑
第三天	09:00-10:00	酶的理性设计专题之三：酶与底物相互作用机理研究(QM/MM) QMMM 基本原理介绍、参数设置意义、实际操作技巧及结果分析
	10:00-10:45	酶的理性设计专题之四：基于亲和力进行酶设计 突变位点、突变组合的建议，原理介绍、参数设置意义、实际操作技巧及结果分析
	10:45-11:00	茶歇
	11:00-11:45	酶的理性设计专题之四：基于热稳定性进行酶设计 突变位点、突变组合的建议，原理介绍、参数设置意义、实际操作技巧及结果分析
	11:45-13:30	午餐
	13:30-15:00	酶的理性设计专题之四：蛋白二硫键的预测与引入 二硫键位点的选取方法，实际操作技巧及结果分析。 酶的理性设计专题之四：基于蛋白聚集效应进行酶设计 建议可能的突变位点降低酶的聚集，基本原理介绍、参数设置意义、实际操作技巧及结果分析
	15:00-15:15	茶歇
	15:15-16:30	酶的理性设计专题之五：筛选酶的潜在底物 筛选命中率提高的方法，Libdock 基本原理介绍、参数设置意义、实际操作技巧及结果分析
	16:30-17:15	课程讨论及答疑

