

2020 年创腾科技生命科学分子模拟课程

4 月计算机辅助酶的理性设计

培训相关信息如下：

培训时间：2020 年 4 月 15-17 日，共三天

培训地点：**在线课程**

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

| 培训费用 | 特惠价格及条件（符合任一条件即可）： |
|--------|--|
| 1人参加 | 1、同一单位， ≥2人 参加； 2、同一学员（2011年至今）曾参加过DS培训课程。 |
| 3000/人 | 2400/人 |

注：1、培训费包含听课费、资料费。

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

七、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/>



创腾科技有限公司 生命科学部

2020年2月24日

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：在线课程 |
| | 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 |

