

2020 年创腾科技生命科学分子模拟在线课程

DS 暑期特训班

培训相关信息如下：

培训时间：2020 年 7 月 20-24 日，共五天

培训地点：**在线课程**

学员福利：

- 1、我们为所有学员提供**服务器**，所有报名学员都可以**远程连接**。
- 2、凡**第三次或以上**参加“创腾学院”DS 培训班的学员，均可领取一张当年内有效的**半价券**。（注：本券只限本人使用，不可转让）

一、培训主旨

分子模拟经过几十年的发展，不论在基础理论还是在应用方面，都取得了巨大成就，已经成为化学和生命科学等领域一种必不可少的研究手段，引起了理论和实验工作者的广泛关注。Discovery Studio 是当前主流的面向生命科学领域的综合性分子模拟平台，通过高质量的图形界面、经多年验证的科学算法以及集成的环境，为科研工作者提供了易用高效的药物设计与大分子模拟技术和工具。趁着暑期，创腾科技有限公司将于苏州开设一场生命科学分子模拟暑期特训课程，该班至今已成功举办了二十次。本次培训班旨在帮助学员系统了解、掌握 Discovery Studio 中各种经典的分子模拟技术的核心原理、参数设置技巧、结果分析及应用思路，并能快速进行上机操作，从而在以后的科研工作中可以灵活调用相关的模拟功能开展模拟工作，解释实验现象或者为实验提供指导。

二、培训对象

所有对分子模拟感兴趣、希望了解分子模拟并将模拟技术应用于药物研发、蛋白结构功能研究、抗体研究、酶研究、多肽研究或环境毒理研究等领域的科研人员；所有对 Discovery Studio 软件感兴趣、希望进一步系统掌握 DS 软件中所有经典功能的原理及应用并能够快速上机模拟操作相关课题的老师和同学等。

三、培训内容

本次培训班将会介绍 Discovery Studio 新版本 2020 在药物设计和计算生物学领域的每个应用技术专题，整个培训的技术专题包括：

- 蛋白序列分析、翻译后修饰位点预测
- 蛋白质三维结构预测
- 膜蛋白加显性膜环境三维结构预测及分子动力学优化 (New!)
- 抗体结构预测
- 抗体人源化改造
- 蛋白-小分子相互作用预测
- 蛋白-蛋白 (核酸/多肽) 相互作用预测



- 蛋白质工程（酶/抗体的理性设计与改造）
- 支持 GPU 计算的分子动力学模拟
- 拉伸分子动力学模拟
- 分子力学/量子力学 QM/MM 模拟
- 基于靶标结构的药物设计（分子对接/片段药物设计/药效团模型）
- 基于小分子配体的药物设计（药效团模型/QSAR）
- 基于大批量小分子配体结构产生药效团模型（New!）
- Me too/me better 药物设计（化合物骨架跃迁等）
- 化合物库的虚拟筛选
- 全新药物设计
- 反向找靶/老药新用（Updated!）
- 组合化学及组合化合物库分析
- ADMET 性质预测
- FEP 计算配体相对结合自由能
- MLSD 基于 GPU 批量计算配体组合库相对结合自由能（New!）

四、培训形式

所有培训学员每人可有充分的时间对培训班的每个技术点进行软件的上机操作，我们的工程师将全程提供技术服务。培训班结束后，我们将向每一位学员颁发创腾科技有限公司的生命科学模拟软件技术认书。具体培训形式如下：

- 基础方法和技术原理的讲解
- 软件的基础操作、参数设置讲解与上机练习（提供完整的培训教程）
- 通过文献案例的分析分享该模拟技术与实际科研工作结合应用思路
- 学员交流与讨论，工程师进行在线答疑。

五、培训费用

| | |
|--------|---|
| 1 人参加 | 特惠价格及条件（符合任一条件即可）： 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。 |
| 4000/人 | 3400/人 |

- 注：1、培训费包含 **100 元邮寄纸质版教材费用**，课程结束后不再发送电子版 PPT 和教材。
- 2、发票为电子发票，学员缴费后扫码填写发票信息，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：

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

创腾学院微信公众号



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6月3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 |
| | 09:00-10:15 | Discovery Studio 的基本界面及基本操作 |
| | 10:15-10:25 | 休息 |
| | 10:25-12:00 | 基于受体的药物设计专题之一：基于“热区”匹配的高通量虚拟筛选模块：DS_LibDock |
| | 12:00-14:00 | 午餐时间 |
| | 14:00-15:30 | 基于受体的药物设计专题之二：基于格点计算的精确分子对接模块：DS_CDOCKER |
| | 15:30-15:40 | 休息 |
| | 15:40-17:10 | 基于受体的药物设计专题之三：全柔性的对接模块：DS_Flexible Docking |
| | 17:10-17:30 | 基于受体药物设计专题总结 |
| | 17:30-18:00 | 答疑 |
| 第二天 | 09:00-10:15 | 先导化合物优化&全新药物设计专题之一：AutoLudi |
| | 10:15-10:25 | 休息 |
| | 10:25-10:55 | 先导化合物优化&全新药物设计专题之二：Ludi |
| | 10:55-12:00 | 先导化合物优化&全新药物设计专题之三：MCSS |
| | 12:00-14:00 | 午餐时间 |
| | 14:00-14:45 | 先导化合物优化&全新药物设计专题之四：Grow Scaffold |
| | 14:45-15:30 | 先导化合物优化&全新药物设计专题之五：Replace fragment |
| | 15:30-15:40 | 休息 |
| | 15:40-17:10 | 先导化合物优化&全新药物设计专题之六：FEP 计算配体相对结合自由能 |
| | 17:10-17:30 | 先导化合物优化&全新药物设计专题之七：MSLD 计算配体组合库相对结合自由能及总结 |
| | 17:30-18:00 | 答疑 |
| 第三天 | 09:00-10:20 | 药效团模型专题之一：基于配体的定性药效团模型构建 (HipHop) 及应用 |
| | 10:20-10:30 | 休息 |
| | 10:30-12:00 | 药效团模型专题之二：基于配体的定量药效团模型构建 (HypoGen) 及应用 |
| | 12:00-14:00 | 午餐时间 |
| | 14:00-15:00 | 药效团模型专题之三：基于大批量活性化合物配体结构构建药效团模型 (EPG) |
| | 15:00-15:10 | 休息 |
| | 15:10-16:00 | 药效团模型专题之四：基于靶标结构的药效团模型产生及应用 (SBP) |
| | 16:00-16:15 | 药效团模型专题之五：基于配体-受体晶体复合物的药效团模型产生及应用 (CBP) |
| | 16:15-17:30 | 药效团模型专题之六：反向找靶及药效团模型专题总结 |
| | 17:30-18:00 | 答疑 |
| 第四天 | 09:00-10:15 | 三维定量构效关系 (3D QSAR) |
| | 10:15-10:25 | 休息 |
| | 10:25-11:25 | 药物药代及毒性预测：DS_ADMET&DS_TOPKAT |
| | 11:25-12:00 | 虚拟组合化合物库的设计与分析 |



| | | |
|-----|-------------|---|
| | 12:00-14:00 | 午餐时间 |
| | 14:00-14:30 | 蛋白质序列分析: 蛋白翻译后修饰位点预测、抗原线性表位预测 |
| | 14:30-15:50 | 蛋白质同源建模专题之一: 球蛋白建模 |
| | 15:50-16:00 | 休息 |
| | 16:00-16:40 | 蛋白质同源建模专题之二: GPCR 类膜蛋白建模及优化 (包括隐形膜和显性膜环境) |
| | 16:40-17:30 | 蛋白质同源建模专题之三: 抗体建模 |
| | 17:30-18:00 | 答疑 |
| 第五天 | 09:00-10:15 | 生物大分子间相互作用模式的预测: DS ZDOCK |
| | 10:15-10:25 | 休息 |
| | 10:25-12:00 | 蛋白质设计专题之一: 虚拟氨基酸突变 |
| | 12:00-14:00 | 午餐时间 |
| | 14:00-14:30 | 蛋白质设计专题之二: 蛋白质二硫键预测 |
| | 14:30-15:30 | 蛋白质设计专题之三: 蛋白质性质及聚集效应预测及抗体人源化 |
| | 15:30-15:40 | 休息 |
| | 15:40-16:40 | 分子力学、支持 GPU 计算的分子动力学模拟介绍及应用 |
| | 16:40-17:00 | 拉伸分子动力学简介及应用 |
| | 17:00-17:30 | 量子力学 (QM) /分子力学 (MM) 简介及应用 |
| | 17:30-18:00 | 答疑 |

