

# 2020 年创腾科技生命科学分子模拟课程

## 10 月计算机辅助药物分子设计

培训相关信息如下：

培训时间：2020 年 10 月 21-23 日，共三天

培训地点：**在线课程**

学员福利：

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

计算机辅助药物设计是在合理药物设计探索中迅速发展起来的一种新药研究与开发新技术，是药物发现中不可或缺的重要手段和工具。计算机辅助药物设计在合理药物设计中，可进行药物虚拟筛选、药物-靶点作用模型模拟、药物活性构象分析、药物构效关系分析、药效团识别、药物结构设计与改造、me too/me better 药物设计、药物成药性分析，大大提高了药物设计水平、速度和成功率，使得药物设计从基于偶然性趋向于合理化。本次培训班旨在帮助学员们了解药物虚筛、改造的思路和策略，以及基于 Discovery Studio 这一强大的计算机辅助药物设计软件如何开展药物设计工作，进而快速高效的发现先导化合物并进行先导化合物的优化。

### 二、培训对象

从事药物研发相关领域的科研工作者，有兴趣想要借助 Discovery Studio 软件来开展药物设计工作的相关人员，希望能进一步系统掌握分子模拟技术、软件使用技巧、能够快速上机模拟操作相关课题的老师和同学。

### 三、培训内容

本次培训课程将会介绍 Discovery Studio 软件中多种经典的计算机辅助药物设计技术以及如何应用这些技术进行药物的虚筛、药物的改造、药物作用机制的分析等，具体包括：分子对接、片段药物设计、药效团模型构建、类药性分析、结构相似性分析、ADMET 分析、分子动力学模拟等。同时，通过演示操作分享这些经典功能的参数设置技巧、结果分析方法等，从而帮助学员从理论到操作都能更系统地将这些技术学以致用。

本次培训将为参加人员开通 MAXFLOW 标准版账号，参加人员可以通过 MAXFLOW 标准版使用 DS 全部教程。MAXFLOW 标准版是创腾科技为广大 DS 用户提供的云端技术服务平台，通过 MAXFLOW 大家可以享受以下服务和资源：

**支持中心** ① 支持社区，用户提出问题，技术专家会及时做出解答

② 问题精析，DS 常见的一些使用问题解答

**知识中心** ① 操作教程，DS 各功能模块使用操作步骤教程



② 视频中心, 各功能模块操作视频教程

**资源中心** ① 文献中心, DS 在模拟设计中的文献应用案例

② 新功能精析, DS 各版本新功能介绍

#### 四、培训形式

- 通过文献案例分析介绍经典药物设计方法在药物虚筛、改造等方面的应用;
- 演示操作: 讲解经典药物设计方法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):
3100/人	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。
	2500/人
<b>拼团大促:</b> ◎ 5 人拼团价 (不限同一单位) <b>2300 元/人</b> ◎ 10 人拼团价 (不限同一单位) <b>2000 元/人</b> <b>注意事项:</b> 1、由于线上培训需要提前一周邮寄教材, 请各位务必在开课前一周完成拼团和汇款工作。 2、所有拼团的人报名时都必须写清楚 <b>几人团</b> , 并加上 <b>团长的名字</b> , 以便于工作人员统计整理。 3、团购活动适用于 <b>2020 年 8 月至 12 月 30 日</b> 任意 DS 培训班。	

注: 1、培训费包含 **100 元邮寄纸质版教材费用**。(课程结束后不再提供电子版 PPT 以及电子版教材)

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](mailto: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	09:00-10:45	<b>Discovery Studio 基本界面</b> DS 背景介绍、界面及基础操作, 蛋白、小分子及数据库的预处理, 类药性分析等。
	10:45-11:00	茶歇
	11:00-12:00	<b>药物的虚拟筛选-分子对接 LibDOCK</b> 分子对接的核心与原理, 蛋白活性位点定义方法, 分子对接结果的分析, 对接算法和打分函数的选取, LibDOCK 的原理等。
	12:00-14:00	午餐
	14:00-15:15	<b>药物相互作用模式预测-分子对接 CDOCKER</b> CDOCKER 原理介绍、参数设置技巧和实际操作技巧等。
	15:15-15:30	茶歇
	15:30-16:30	<b>精确的药物作用模式预测-分子对接 Flexible Docking</b> 对接过程中蛋白分子柔性的考虑方法, Flexible Docking 原理介绍、参数设置技巧和实际操作技巧等。
	16:30-17:00	课程讨论及答疑



第二天	09:00-10:15	<b>药物的虚拟筛选-定性药效团模型的构建 HipHop</b> 经典的基于配体的药物设计方法, 训练集分子的选取依据, 药效团模型的评价方法, 基于药效团的虚筛方法。Hiphop 参数设置技巧、实际操作技巧及结果分析。
	10:15-10:30	茶歇
	10:30-12:00	<b>药物的虚拟筛选-定量药效团模型的构建 HypoGen</b> 经典的基于配体的药物设计方法, 训练集分子的选取依据, 药效团模型的评价方法, 基于药效团的虚筛方法。HypoGen 参数设置技巧、实际操作技巧及结果分析。
	12:00-14:00	午餐
	14:30-15:30	<b>药物的虚拟筛选-基于靶标结构的药效团模型构建 SBP</b> SBP 方法的原理、实际操作方法。
	15:30-15:45	茶歇
	15:45-16:30	<b>药物的虚拟筛选-基于受体-配体复合物的药效团模型构建 CBP</b> <b>反向找靶-基于药效团模型数据库 PharmaDB</b> CBP 方法的原理、实际操作方法, 基于药效团的虚拟筛选, 基于药效团数据库的反向找靶等。
	16:30-17:00	课程讨论及答疑
第三天	09:00-10:30	<b>药物的虚拟筛选-数据库的分析</b> 基于结构相似性、多样性对化合物数据库的分析筛选。
	10:30-10:45	茶歇
	10:45-11:15	<b>化合物成药性评价-ADMET 性质的分析</b> ADMET/TOPKAT 基本原理介绍、参数设置及结果报告分析。
	11:15-12:00	<b>药物的虚拟设计-基于片段的药物设计 LUDI</b> 基于 LUDI 的虚拟筛选, LUDI 的算法原理、参数设置技巧和实际操作技巧。
	12:00-14:00	午餐
	14:00-15:00	<b>先导化合物优化-基于片段的药物设计 Grow Scaffold / Replace Fragment</b> 化合物改造的新方法, 化合物电子等排体的替换方法, 化合物片段生长的新方法, 化合物骨架跃迁, 参数设置技巧和实际操作技巧等。
	15:00-15:15	茶歇
	15:15-16:30	<b>结构优化及构象分析-分子动力学 CHARMm</b> MD 基本原理、参数设置及结果分析, 溶剂模型的添加, 束缚条件的设定, MD 平衡状态的判定等。
16:30-17:00	课程讨论及答疑	

