

# 2020 年创腾科技生命科学分子模拟在线课程

## 新时代你应该知道的中药现代化解决方案

培训相关信息如下：

培训时间：2020 年 11 月 18-20 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

中医药是我国传统医药学，采用现代方法开发中药无疑仍具有广阔的发展空间，而分子模拟技术的引入，也为中药新药研发提供了新的思路。本次培训班旨在帮助学员系统了解、掌握如何应用分子模拟技术解决中药设计的一些热点问题，如：中药靶向原理和有效成分的预测、中药的虚拟筛选、中药-靶标作用机理解释、中药结构的改造与优化、中药构效关系的分析、中药的成药性评价等。

### 二、培训对象

从事中药研发或药物研发相关领域的科研工作者，希望了解分子模拟、对分子模拟感兴趣、想借助分子模拟技术来开展中药研究工作的相关人员。

### 三、培训内容

本次培训主要以 Discovery Studio 软件为依托，对 DS 中多种分子对接算法、全方位的药效团模型构建方法、基于目前市场上最全药效团模型数据库的反向找靶方法、全面的基于片段的药物设计策略、定量构效关系的分析、ADMET 性质的预测及类药性的分析等技术方法及在中药领域中的应用进行全面介绍与探讨。此外，本次培训也将介绍 TCMD 中药化学数据库的检索及应用。

- 中药化合物的虚拟筛选：以 TCMD 中药化学数据库为虚筛来源，基于分子对接、药效团、LUDI 片段设计、ADMET 预测、类药性分析进行虚拟筛选；
- 中药有效成分的确定及潜在靶标的搜寻：基于药效团确认中药有效成分，基于药效团模型数据库 PharmaDB 进行靶标的反向虚筛；
- 中药化合物构效关系的解释以及药靶作用机理解释：基于分子对接预测中药化合物-靶标的作用模式和关键氨基酸位点并解释构效关系，基于 QSAR 方法分析中药化合物的构效关系；
- 中药化合物的改造：基于分子对接、药效团、片段药物设计、QSAR 在中药化合物骨架基础上进行改造与优化。



本次培训将为参加人员开通 MAXFLOW 标准版账号,使用时间**两个月**,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 大家可以享受到以下服务和资源:

### 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;
- 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。
3100/人	2500/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



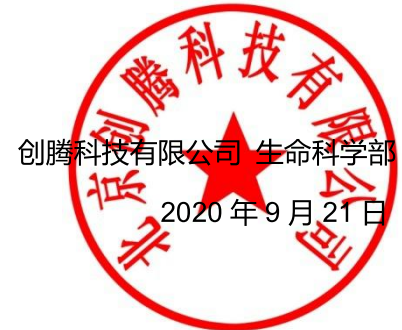
## 七、培训班联系人

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](mailto: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9月21日



日期	时间	内容
第一天	9:00-9:30	<b>中药化学数据库 TCMD 检索及应用的介绍</b> 检索有哪些化合物从某种指定中药药用植物中分离得到；基于结构式进行精确或子结构检索；从药理活性数据检索化合物及其对应的植物来源等；将 TCMD 数据导出并基于 DS 进行虚筛。
	09:30-10:45	<b>Discovery Studio 基本界面</b> 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入门操作。
	10:45-11:00	休息
	11:00-12:00	<b>中药靶标结构的预测-同源建模 MODELER</b> 同源建模的原理、参数设置及案例分析，同源模板的选取、序列比对的技巧，模型的优化与评估。
	12:00-14:00	午餐
	14:00-15:30	<b>基于结构的中药筛选-分子对接 LibDOCK</b> 化合物虚筛流程的介绍，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，最优对接构象的选取方法，分子对接算法的选取方法，虚筛真阳性分子命中率的提高方法，LibDOCK 的原理、参数设置及案例分析等。
	15:30-15:45	休息
	15:45-16:30	<b>中药-靶标作用机理研究 -分子对接 CDOCKER</b> 关键氨基酸的识别与显示方法，作用机理的解释手段，CDOCKER 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>中药-靶标作用机理研究-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。
	10:15-10:30	休息
	10:30-12:00	<b>基于药效团的中药筛选-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。
	12:00-14:00	午餐
	14:00-15:00	<b>基于药效团的中药筛选-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。
	15:00-15:15	休息
	15:15-16:30	<b>基于药效团的中药筛选-基于靶标结构的药效团模型构建 SBP、CBP</b> SBP、CBP 方法的原理、实际操作方法，基于药效团的虚筛方法。
	16:30-17:00	课程讨论及答疑
第三天	09:00-10:00	<b>中药有效成分的确定、中药靶标的搜寻：药效团模型数据库 P harmaDB</b> 反向找靶的策略，中药有效成分的确定，基于药效团反向找靶的结果分析，基于药效团确认中药有效成分的结果分析等。
	10:00-10:15	休息
	10:15-12:00	<b>中药化合物构效关系的分析 2D-QSAR/3D-QSAR</b>



		定量构效关系方法的原理介绍、参数设置技巧和实际操作技巧等。
<b>12:00-14:00</b>	<b>午餐</b>	
<b>14:00-15:30</b>	<b>中药化合物的改造-基于片段的药物设计 LUDI/MCSS</b>	全新药物设计方法，分子的优化与改造方法，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。
<b>15:30-15:45</b>	<b>休息</b>	
<b>15:45-16:30</b>	<b>中药化合物的改造-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。
	<b>中药化合物成药性评价</b>	<b>-ADMET 性质的预测、类药性的分析</b>
<b>16:30-17:00</b>	<b>课程讨论及答疑</b>	

