

# 2020 年创腾科技生命科学分子模拟课程

## 12 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 12 月 23-25 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

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，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，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；
- 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

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
<p><b>拼团大促：</b></p> <p>◎ 5人拼团价（不限同一单位）<b>2300元/人</b></p> <p>◎ 10人拼团价（不限同一单位）<b>2000元/人</b></p> <p><b>注意事项：</b></p> <p>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。</p> <p>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。</p> <p>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。</p>	

- 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

## 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	08:30-09:00	报到和注册
	09:00-10:30	<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实际操作。
	10:30-10:45	茶歇
	10:45-11:45	<b>酶的理性设计概述</b> <b>酶的理性设计专题之一：酶的序列分析</b> 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。 <b>酶的理性设计专题之二：酶结构的构建</b> 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。
	11:45-12:00	课程讨论及答疑
	12:00-14:00	午餐
	14:00-15:30	<b>酶的理性设计专题之二：酶结构的构建</b> 同源建模参数设置意义、实际操作技巧及结果分析。
	15:30-15:45	茶歇
	15:45-16:30	<b>酶的理性设计专题之三：筛选酶的潜在底物 (libdock)</b> 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, libdock 基本原理及案例分析。
16:30-17:00	课程讨论及答疑	
第二天	09:00-10:15	<b>酶的理性设计专题之三：筛选酶的潜在底物 (Libdock)</b> Libdock 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	<b>酶的理性设计专题之四：酶与小分子底物相互作用机理研究(CDOCKER)</b> CDOCKER 基本原理及案例分析, 参数设置意义、实际操作技巧及结果分析。
	11:45-12:00	课程讨论及答疑
	12:00-14:00	午餐
	14:00-15:00	<b>酶的理性设计专题之四：酶与小分子底物相互作用机理研究(Flexible Docking)</b> 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。
	15:00-15:15	茶歇
	15:15-16:30	<b>酶的理性设计专题之四：酶与蛋白底物相互作用机理研究 (ZDOCK)</b> 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。
16:30-17:00	课程讨论及答疑	



第三天	09:00-10:30	<b>酶的理性设计专题之四：酶与底物相互作用机理研究(分子动力学模拟)</b> 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。
	10:30-10:45	茶歇
	10:45-11:30	<b>酶的理性设计专题之四：酶与底物相互作用机理研究(QM/MM)</b> QMMM 基本原理介绍、参数设置意义、实际操作技巧及结果分析
	11:30-12:00	课程讨论及答疑
	12:00-14:00	午餐
	14:00-15:15	<b>酶的理性设计专题之五：基于亲和力进行酶设计</b> 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 <b>酶的理性设计专题之五：基于热稳定性进行酶设计</b> 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
	15:15-15:30	茶歇
	15:30-16:30	<b>酶的理性设计专题之五：蛋白二硫键的预测与引入</b> 二硫键位点的选取方法，实际操作技巧及结果分析。 <b>酶的理性设计专题之五：基于蛋白聚集效应进行酶设计</b> 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
	16:30-17:00	课程讨论及答疑

