

2019 年创腾科技生命科学分子模拟课程

新时代你应该知道的中药科学化解决方案

培训相关信息如下：

培训时间：2019 年 11 月 20-22 日，共三天

培训地点：苏州创腾科技培训中心（江苏省苏州市工业园区东长路 88 号 2.5 产业园 A2 栋 301 室）

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并快速上机操作，如：中药靶向原理和有效成分的预测、中药的虚拟筛选、中药-靶标作用机理的解释、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并能快速上机模拟操作的相关人员。

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的解释：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。

四、培训形式

- 1、通过文献案例分析讲解中药设计策略，以及相应功能模块的原理介绍；
- 2、上机操作：讲解中药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）；
- 3、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	1人参加	特惠价格及条件（符合任一条件即可）： 1、10月30日前成功报名并汇款； 2、同一单位，≥2人参加； 3、同一学员（2011年至今）曾参加过DS培训课程。
学术客户	3600/人	3000/人
企业客户	5400/人	4800/人

注：1、培训费包含听课费、资料费、上机费、午餐。住宿和交通费自理。

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

b、**现金支付**：培训现场可收取现金或刷卡。

七、交通地图

南门地址：江苏省苏州市工业园区东长路88号A2栋301室

西门地址：江苏省苏州市工业园区方中街东50米星巴克旁A2栋301室

【注：建议学员从西门进，离A2栋301室培训教室较近。】





交通路线参考：

• 苏州园区火车站

- 1、【沪宁城铁园区站广场站】上车坐 258 路（星湖首末站北方向），【星湖立交南站】下车，换乘快线 7 号（凤凰城首末站南方向），【凤凰城首末站】下车，步行 350 米到。全程约 1 小时。
- 2、打车最短距离约 11 公里，费用约 30 元。

• 苏州站

- 1、地铁 4 号线（同里方向）【苏州火车站】上车，【乐桥站】下车换乘地铁 1 号线（钟南街方向），至【南施街站】下车 1 号口出，【园区城管大厦站】上快线 7 号路（凤凰城首末站方向），【凤凰城周末站】下车，步行 350 米到。全程约 1 小时 10 分钟。
- 2、打车最短距离约 21 公里，费用约 55 元。

• 苏州北站

- 1、【京沪高铁苏州北站】乘坐快线 7 号（凤凰城首末站方向），【凤凰城首末站】下车，步行 350 米到达，全程约 1 小时 30 分钟。
- 2、打车最短距离约 22 公里，费用约 60 元。

八、周边住宿(请学员自行预定，费用自理)

- 1) 宾馆名称：桔子酒店（精选） 0512-62628333（最近）
宾馆地址：江苏省苏州市吴中区港田路南 70 米文化人才公寓 9 楼

注：本酒店为创腾学院协议酒店，预定时说明是参加创腾培训即可享受协议价格。

- 2) 宾馆名称：汉庭酒店(苏州凤凰新天地店) 0512-62805388
宾馆地址：苏州工业园区南榭雨街 9 号凤凰新天地商业二期 41 幢 103 号



- 3) 宾馆名称: 苏州东沙湖邻里商务酒店 0512-67997868
 宾馆地址: 苏州工业园区东沙湖路 100 号
- 4) 宾馆名称: 宜必思酒店(苏州工业园区中心酒店) 0512-81879966
 宾馆地址: 江苏苏州市苏州大道东 292 号((地铁 1 号线南施街站 4 号出口处)

注: 以上四个经济型酒店供学员参考。周边住宿非常紧张, 提醒学员提早预定住宿。

九、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/>



附: 培训班日程安排。



日期	时间	内容
第一天	8:00-9:00	报到和注册 报到地点：苏州创腾培训中心
	9:00-9:30	中药化学数据库 TCMD 检索及应用的介绍 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	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入门操作。
	10:45-11:00	茶歇
	11:00-12:00	中药靶标结构的预测-同源建模 MODELER 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。
	12:00-13:30	午餐
	13:30-15:30	基于结构的中药筛选-分子对接 LibDOCK 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	茶歇
	15:45-17:15	中药-靶标作用机理研究 -分子对接 CDOCKER 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。
17:15-18:00	课程讨论及答疑	
第二天	09:00-10:15	中药-靶标作用机理研究-分子对接 Flexible Docking 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	茶歇
	10:30-12:00	基于药效团的中药筛选-定性药效团模型的构建 HipHop 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。
	12:00-13:30	午餐
	13:30-15:00	基于药效团的中药筛选-定量药效团模型的构建 HypoGen 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。



第三天	15:00-15:15	茶歇
	15:15-16:15	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 SBP 方法的原理、实际操作方法, 基于药效团的虚筛方法。
	16:15-17:15	基于药效团的中药筛选-基于受体-配体复合物的药效团模型构建 CBP CBP 方法的原理及操作, 基于药效团的虚筛方法。
	17:15-18:00	课程讨论及答疑
	09:00-10:00	中药有效成分的确定、中药靶标的搜寻: 药效团模型数据库 PharmaDB 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	茶歇
	10:15-12:00	中药化合物构效关系的分析-2D-QSAR/3D-QSAR 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。
	12:00-13:30	午餐
	13:30-15:00	中药化合物的改造-基于片段的药物设计 LUDI/MCSS 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。
	15:00-15:15	茶歇
	15:15-16:30	中药化合物的改造-基于片段的药物设计 Grow Scaffold / Replace Fragment 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。
	16:30-17:15	中药化合物成药性评价 -ADMET 性质的预测、类药性的分析

