

2017 年 Discovery Studio 学习体验日 (免费) 上海站

尊敬的老师和同学，您好！

Discovery Studio (简称 DS)，作为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和经多年验证的科学算法，不仅为科研工作者们提供了一个易于操作、用户体验度高的建模环境，而且还可以大大助力于小分子药物和生物药物的创新与研发、酶工程、食品学、环境毒理研究等，降低研发成本，缩短研发周期，提高研发效率，解释实验现象。

2015 年-2016 年创腾科技有限公司在全国共成功举办了 6 场体验日活动，吸引了超过近千位相关领域的科研工作者参加。为满足广大客户的学习需求和热情，我们计划于 **2017 年 4 月 6 日在复旦大学张江校区** 举办该学习体验活动，依托最新版本的 Discovery Studio 2017R2，为您提供一个免费交流学习分子模拟方法和应用的机会与平台。

体验日当天，我们将会介绍 **Discovery Studio 2017 R2** 新功能，并以 Discovery Studio 软件的基础操作和应用为核心，以热点实例为基础，介绍时下在药物设计、抗体设计和酶设计等领域应用广泛的分子模拟技术，如分子对接、药效团模型、同源建模、反向找靶、蛋白质理性设计等，帮助大家快速掌握所涉及模块的基本原理、功能特点、结果分析和应用范围，进而学以致用。

活动具体信息如下：

一、活动相关信息如下：

活动时间：2017 年 4 月 6 日 (周四)

活动地点：复旦大学张江校区行政楼 106

活动地址：上海市浦东新区张衡路 825 号

二、活动日程安排：

时间	内容
08:00-09:00	报到和注册 报到地点：复旦大学张江校区行政楼 106
9:00-11:30	Discovery Studio 2017R2 新功能介绍，基本界面和入门操作 -DS 背景介绍 -DS 界面介绍 -DS 入门操作 -体系预处理及操作 小分子的构建与保存，小分子间的叠合；蛋白结构分析、结晶水的处理、多聚体的处理、多肽/核酸/多糖分子的构建、分子间相互作用 2D/3D 的分析、蛋白间的叠合、PPT 分子三维展示、作图及保存输出。

11:30-11:40	集体合影
11:40-13:30	午餐时间 (午餐自理)
13:30-14:30	同源建模 (蛋白三维结构预测) -同源建模流程和原理 -模板的选取 -序列的比对 -模型的构建、评估与优化
14:30-15:30	分子对接 (Libdock/LigandFit/CDOCKER/FlexibleDocking) -分子对接概述 -四种对接方法的原理与区分 -基于对接的蛋白 (核酸)-小分子互作机理解释 (靶标-药物互作、酶-底物互作、抗体-半抗原互作等) -基于对接的化合物虚拟筛选 -基于对接的构效关系分析与化合物改造
15:30-15:40	茶歇时间
15:40-16:40	药效团模型 (HipHop/HypoGen/SBP/CBP) -药效团模型概述 -四种药效团模型的区分 -药效团模型构建与验证 -基于药效团模型的化合物虚拟筛选 -基于药效团模型的化合物反向找靶
16:40-17:30	蛋白质理性设计 (虚拟氨基酸突变/二硫键预测/聚集效应预测) -抗体设计 抗体亲和力成熟、抗体稳定性设计、抗体聚集效应的预测 -酶设计 酶的稳定性设计、酶的亲和力设计
<p>1) 通过讲解和学习, 掌握 DS2017R2 中经典分子模拟技术的原理、应用及软件上机操作。 2) 参加现场活动的师生, 可获得 '创腾学院' 相关培训课程的优惠价格。</p>	

三、参加对象:

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、抗体研究或酶研究领域的高校或企业科研人员; 对 Discovery Studio 软件感兴趣、希望了解 Discovery Studio 软件的高校或企业科研人员。

四、活动费用：免费活动（食宿交通等费用自理）

五、学习电脑：

因教室座位有限，现只招收**60**位名额，以报名先后顺序安排座位，报满为止！**学员需自带电脑**！请在活动开始前自行下载并安装DS软件。学员可根据自己手提电脑配置自行下载所对应的版本：

下载链接：<http://pan.baidu.com/s/1nvDJbaL>

密码：xvdo

六、报名方式：

网页报名：报名[请点击此处](#)提交回执后 3 个工作日内会收到一封确认邮件，敬请留意！

手机报名：请扫描以下二维码，识别后填写相关信息提交即可；



注：1) 因教室座位有限，现只招收 60 个名额，以报名先后顺序安排座位，报满为止！

2) 若临时取消报名，务必提前通知工作人员；活动当日请提早报到，若活动开前 5 分钟仍不到现场，为您预留的座位将由旁听席学员顶替。

七、活动咨询：

活动问题：021- 51821768 转 242， 13482108233（曹小姐）

技术问题：021- 51821768 转 225， 13817575424（方小姐）

报名邮箱：market@neotrident.com

创腾科技官网：www.neotrident.com

创腾学院子网：<http://training.neotrident.com>

北京创腾科技有限公司
生命科学事业部门

2017 年 3 月