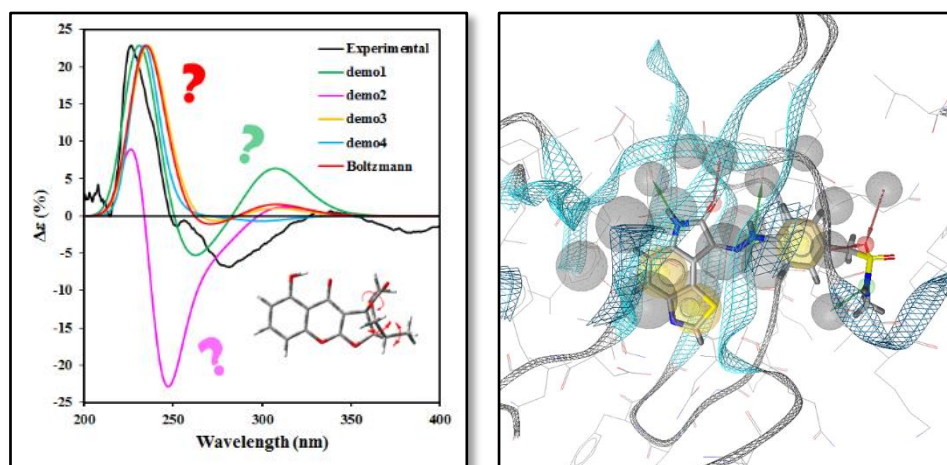


ECD 计算与药效团建模



【课程介绍】

1、ECD 计算辅助立体化学结构确证

电子圆二色谱 (Electronic Circular Dichroism, ECD) 是目前比较流行的立体化学结构确证技术。本次培训班以我们已经发表的一项研究作为例, 详细介绍如何使用 Gaussian 09 和其他辅助软件进行 ECD 计算, 再与实验数据比较, 从而确定化合物的绝对构型。

在本次培训中, 我们特别增加了构象分析这一重要环节, 它将解决不少学员在长期研究中遇到的 ECD 计算“时而奏效, 时而失效”的问题。通过本次培训, 学员们能够熟悉掌握这一项完善的 ECD 计算辅助立体化学结构确证技术, 并能迅速运用到自己的研究项目中。

2、药效团建模与虚拟筛选

药效团是基于药效特征元素为基础建立的模型, 总结出对活性起关键作用的结构特征。近些年, 随着化合物数据库和计算机技术的发展, 用药效团模型对数据库的进行虚拟筛选得到了广泛的应用, 已经成为发现先导化合物的重要手段之一。本次培训班将通过讲解和练习 LigandScout 进行药效团建模与虚拟筛选的全部功能, 让学员们迅速掌握该项技术。

【软件简介】

CONFLEX 7

构象分析, 本身也可以用来进行 ECD 计算, 主要是将其生成的构象用 Gaussian 09 进一步处理 (优化与 ECD 计算)。

Gaussian 09

Gaussian 09 是 Gaussian 系列电子结构软件的最新版本, 被世界各地的化学家、化学工程师、生物化学家、物理学家和其他学科的科学家们所广泛使用。Gaussian 09 从量子力学的基本定律出发, 在各种不同的化学环境中预测分子结构、能量、振动频率、分子性质与反应。

LigandScout 3

LigandScout 是 Inte:Ligand 公司推出的旗舰产品，是基于 3D-药效团模型进行精确虚拟筛选的集成平台。它提供了无缝的工作流；支持基于配体或基于结构的药效团建模；还包含了一个全新的高性能叠合算法，其具有前所未有的筛选速度与高品质预测质量。此外，它还提供了用户友好的筛选分析工具，包括自动生成 ROC 曲线以便进行性能评估。所有的功能都可以通过我们精心设计的图形用户界面来使用，该界面是我们多年的为建立最有人性化的药效团建模工具经验的结晶。本算法以我们在药效团研究领域信誉卓著的知识为基础并经过科学验证，是本领域最先进的技术。

【课程目标】

- 1、掌握一套科学完整的 ECD 计算辅助立体化学结构确证技术方案；
- 2、掌握 LigandScout 3 高级药效团建模与虚拟筛选技术。

【课程内容】

本次培训以上机学习方式为主，学员们将掌握以下关键技术：

1、ECD 计算辅助立体化学结构确证

- 构象分析；
- 几何优化的诀窍；
- 单一构象 ECD 计算；
- 玻尔兹曼平均；
- 如何解释科顿效应（Cotton Effect）。

2、药效团建模与虚拟筛选

- 基于结构的药效团建模；
- 基于配体的药效团建模；
- 如何科学地评价药效团建模质量；
- 调整药效团特征与运用组合模型；
- 采用药效团对对接构象重打分；
- 构建高质量化合物构象库。

【培训对象】

本次培训班 ECD 计算部分适合已经或打算使用以上技术进行立体化学结构确证的老师、学生或其他科研人员参加；药效团建模部分合适于对靶点预测、小分子-靶点相互作用模式分析与虚拟筛选感兴趣的人员参加。

【课程安排】

时间	主讲人	培训内容
08:30 – 09:00		登记注册
09:00 – 11:30	张子颖	ECD 计算辅助立体化学结构确证
14:30 – 17:30	肖高铿	药效团建模与虚拟筛选

【时间地点】

时间：2014年11月24日

地点：广州市天河区龙口东路34号龙口科技大厦3楼（暂定）

【报名注册】

1、报名方式

下载回执表单后，发送 Email 至 info@molcalx.com 或邮寄至广州市天河区龙口东路34号龙口科技大厦2002。

2、汇款

通过银行汇款

户名：广州市墨灵格信息科技有限公司

账号：36020 15809 10000 6586

开户行：工商银行广州暨南大学支行

汇款留言：姓名+培训+费用所包含的人数，比如：刘德华培训3人

3、领取发票

发票统一在会场领取

4、注册截止日期

2014年11月18日。

【注册费用】

课程内容	注册日期	标准	学生	备注
ECD 计算辅助 立体化学结构确证	10月12日前	800元/人	500元/人	送 CONFLEX 试用1个月
	10月12日后	1000元/人	600元/人	
药效团建模与虚拟筛选	免费			送 LigandScout 试用1个月

注：以上费用包含培训资料费、上机费用及午餐，住宿费和交通费自理。

【联系我们】

广州市墨灵格信息科技有限公司

广州市龙口东路34号龙口科技大厦2002

Tel: 020-38915003, 38261356

Email: info@molcalx.com

Web: <http://www.molcalx.com.cn>

新浪微博: <http://weibo.com/molcalx>

腾讯微博: <http://t.qq.com/molcalx>

《ECD 计算辅助立体化学结构确证与药效团建模》

培训班注册表

姓 名		职 称	
工作单位			
注册类型	<input type="checkbox"/> 工业用户 <input type="checkbox"/> 政府用户 <input type="checkbox"/> 学术用户/教师 <input type="checkbox"/> 学生/博士后		
费 用	<input type="checkbox"/> 1000.00 <input type="checkbox"/> 600.00 其它： _____ <small>*如果多个同事一起注册，请在其它栏写上金额，并在备注写上参会人的注册类型与人数</small>		
研究领域 和方向			
通信地址			邮 编
电 话		电子邮件	
发票抬头			
您最感兴趣的 内容			
备 注			
请于 11 月 1 日之前将注册表发至 info@molcalx.com 。			

广州市墨灵格信息科技有限公司

2014 年 9 月 11 日