

課程名稱：Sybyl 軟體教育訓練

日期：106/1/13(五)

時間：0830-1730

地點：醫學綜合大樓十五樓第二會議室

大綱：本次課程邀請源資國際生物科技股份有限公司的講師，從介紹 SYBYL 基礎、結構準備、分子圖形技術至準備資料庫等，歡迎有興趣的研究者報名。

p.s. 請參與者自行攜帶筆電。

議程：

時間	主題	內容	講師
08:30-12:00	SYBYL/Base	SYBYL 基礎：介面的認識，滑鼠； 結構準備：結構輸入，輸出， 結構優化與分子力場； 分子圖形技術:結構展示	源資國際生物科技股份有限公司 講師
	Topomer Technology: 3D-QSAR,活 性預測與虛擬 篩選	基於配體的設計，採用 Topmer 技術建模、虛擬篩選與活性預 測	
	分子對接與虛 擬篩選	Surflex-Dock：分子對接與虛擬 篩選	
12:00-13:30	午餐時間		
13:30-17:30	同源建模	蛋白從序列到結構的預測	
	組合庫設計	根據反應或試劑設計自己的化 合物庫	
	3D-資料庫搜 索	準備資料庫； 進行柔性篩選； 準備查詢結構：開發基於配體 的查詢結構，開發基於受體-配 體複合物的查詢結構；開發基 於空腔的查詢結構	