

Schrödinger Suite オンライントレーニングコース 2024 実施概要

【対象】

弊社製品をご利用中のお客様(大学研究室でご契約の場合、教員の方・学生の方を問いません)
実際にお持ちのソフトウェアをご使用いただきます。現在ご契約でない製品を利用するコースについては閲覧のみとさせていただきます場合もございますので、ご了承ください。

【開催日程/お申込み期限】

<開催時間> 各 15:10~16:55

	開催日	内容	お申込み期限
1	4月9日(火)	Maestro 基礎	4月3日(水)
2	4月10日(水)	MacroModel を用いた分子モデリング基礎	4月3日(水)
3	4月16日(火)	ドッキングシミュレーション基礎 #1	4月10日(水)
4	4月17日(水)	ドッキングシミュレーション基礎 #2	4月10日(水)
5	4月23日(火)	コマンドライン操作基礎	4月17日(水)
6	5月8日(水)	化合物ライブラリ解析	4月24日(水)
7	5月9日(木)	Ligand-based Drug Design	4月24日(水)
8	5月14日(火)	Protein Preparation	5月8日(水)
9	5月15日(水)	抗体モデリング	5月8日(水)
10	5月21日(火)	ドッキングシミュレーション応用 #1	5月15日(水)
11	5月22日(水)	ドッキングシミュレーション応用 #2	5月15日(水)
12	6月4日(火)	ドッキングシミュレーション応用 #3	5月29日(水)
13	6月5日(水)	コマンドライン操作応用	5月29日(水)
14	6月11日(火)	分子動力学シミュレーション基礎	6月5日(水)
15	6月12日(水)	分子動力学シミュレーション応用	6月5日(水)
16	6月18日(火)	QSAR/QSPR・クラスタリング解析	6月12日(水)
17	6月19日(水)	Maestro usability and customization	6月12日(水)

* お申込み期限を過ぎてからのご登録の際には、当日ご参加いただく上での事前案内が届かない可能性がありますので、ご注意ください。

【内容】**1. 2024年4月9日(火): Maestro 基礎**

(使用製品: Maestro)

各計算プログラムを利用するための共通インターフェースとなる Maestro について、その構成を説明しながら基本的な操作を体験していただきます。

- ・ Maestro の起動と Project の取り扱い
- ・ Workspace(マウスオペレーション)と Project Table/Entry List 上の基本操作
- ・ 立体構造の STYLE 調整(Display/Undisplay, Ribbon, Color, Surface...)
- ・ Maestro 上での簡易的な構造最適化
- ・ 分子構造の編集

* 他のコース参加のための基本操作を紹介する内容となることから、このコースに限りご登録された方々にはレコーディング視聴のための情報を後日ご案内致します。

2. 2024年4月10日(水): MacroModel を用いた分子モデリング基礎

(使用製品: Maestro, MacroModel)

低分子化合物の配座探索計算とそのための準備、得られた複数配座を対象とした解析処理を行うための操作を体験していただきます。分子モデリングの基本概念にも簡単に触れ、初めて計算化学に取り組む方々にも有用な内容としています。

- ・ 分子モデリングの基本概念
- ・ 構造最適化計算
- ・ 単分子を対象とした基本的な配座探索
- ・ 初期的な配座探索結果に対するポスト処理計算
- ・ 配座探索結果の各種解析

* Maestro 基礎コースへの事前参加を推奨

3. 2024年4月16日(火):ドッキングシミュレーション基礎 #1

(使用製品: Maestro, Glide, SiteMap 等)

Glide によるドッキング計算の流れや仕組みを解説するとともに、得られる結合様式の観察を含めた計算結果の解析に必要な操作を体験していただきます。ご自身で計算を実行されずに計算化学者から提供されるデータを活用したい実験系の方々にも有用な内容としています。

- ・ 複合体構造に基づいた活性部位の解析
- ・ ドッキング計算の基本的な流れ
- ・ ドッキング計算結果の解析

* Maestro 基礎コースへの事前参加を推奨

4. 2024年4月17日(水):ドッキングシミュレーション基礎 #2

(使用製品: Maestro, Glide, LigPrep 等)

ドッキング計算に実際に取りかかるため蛋白質やリガンド構造の準備を含めて必要となる一連の操作を説明し、体験していただきます。

- ・ 蛋白質とリガンドの構造準備
- ・ 複数化合物を用いる際のドッキング計算の流れ
- ・ ドッキング計算結果の解析

* Maestro 基礎・ドッキングシミュレーション基礎 #1 コースへの事前参加を推奨

5. 2024年4月23日(火): コマンドライン操作

(使用製品: Maestro, Glide, LigPrep 等)

Maestro を介さずコマンドライン操作により各種計算や処理を行うための基本的な手順を紹介します。

- ・ Maestro からのインプットファイルの作成
- ・ インプットファイルの編集とコマンドラインからの計算実行
- ・ utilities コマンド、Built-in Python Scripts の実行方法

* Maestro 基礎・ドッキングシミュレーション基礎 #1, 2 コースへの事前参加を推奨

6. 2024年5月8日(水): 化合物ライブラリ解析

(使用製品: Maestro, LigPrep, Canvas 等)

ドッキング計算のや Ligand-based のスクリーニングに利用する化合物ライブラリを、仮想的に設計・拡張したり、各種条件で絞り込むことで事前に調製するための操作を説明し、体験していただきます。

- ・ 仮想化合物群の設計・拡張
- ・ 部分構造や物性値による化合物の絞り込み
- ・ Scaffold/R-Group 解析

* Maestro 基礎コースへの事前参加を推奨

7. 2024年5月9日(木): Ligand-based Drug Design

(使用製品: Maestro, LigPrep, Phase)

リファレンスリガンドの立体構造を活用したドラッグデザインのための操作を体験していただきます。いずれも低分子化合物に注目した解析手法となり、実験中心のケミストの方々にも取り組みやすい内容としております。

- ・ 複数リガンドの重ね合わせ
- ・ Pharmacophore モデリングとそれを用いた化合物検索
- ・ Shape Screening

* Maestro 基礎コースへの事前参加を推奨

* 該当週の祝日の関係で、**本回のみ木曜日開催**となりますので実施日時にご注意ください。

8. 2024年5月14日(火): Protein Preparation

(使用製品: Maestro, Prime)

ドッキング計算に用いる蛋白質構造を調製・準備するための手法や機能について様々なオプションの紹介を交えて説明し、必要な操作を体験していただきます。

- ・ 側鎖・ループ欠損を持つ蛋白質構造の修復
- ・ ホモロジーモデリング
- ・ 蛋白質構造の重ね合わせ

* Maestro 基礎ドッキングシミュレーション基礎 #2 コースへの事前参加を推奨

9. 2024年5月15日(水): 抗体モデリング

(使用製品: Maestro, Prime, BioLuminate, PIPER 等)

配列情報から抗体の 3D モデルを作成するための基本的な操作方法や、作成したモデルを用いた PTM Liability、凝集性などの抗体表面のプロパティ解析、In Silico Mutagenesis (安定性と親和性)、ヒト化モデルの作成などの手法を紹介します。合わせて、簡単にタンパク・タンパクドッキング(抗原・抗体ドッキング)にも触れる予定です。

- ・ Modeling an Antibody Structure
- ・ View and Analyze the Ab Modeling Results
- ・ Visualizing an Antibody Structure and Analyzing the Surface
- ・ Multiple Sequence Viewer
- ・ Humanization
- ・ Performing Stability Maturation
- ・ Protein-Protein Docking

* Maestro 基礎コースへの事前参加を推奨

10. 2024年5月21日(火): ドッキングシミュレーション応用 #1

(使用製品: Maestro, Glide, SiteMap 等)

ドッキング計算のオプションとして利用できる各種拘束条件等の紹介を含めて、いくつかのドッキング計算実行時における応用的な使い方とその操作を体験していただきます。

- ・ 水素結合に関する拘束条件を考慮したドッキング計算
- ・ リファレンス化合物における母骨格構造の位置を基準としたドッキング計算
- ・ 活性部位における特定空間位置の占有を条件としたドッキング計算

* Maestro 基礎・ドッキングシミュレーション基礎 #1, 2 コースへの事前参加を推奨

11. 2024年5月22日(水): ドッキングシミュレーション応用 #2

(使用製品: Maestro, Glide, Prime, MacroModel, Canvas 等)

Glide による標準的なドッキング計算で得られた結果の絞り込みや分類を行う方法やドッキング計算から得られた複合体に対する最適化計算を含めて、主にドッキング計算のポスト処理における解析機能とその操作を体験していただきます。

- ・ ドッキング計算結果の各種条件による絞り込み
- ・ ドッキング計算結果の分類
- ・ ドッキング計算で得られた複合体構造の最適化計算

* Maestro 基礎・ドッキングシミュレーション基礎 #1, 2・応用 #1 コースへの事前参加を推奨

12. 2024年6月4日(火): ドッキングシミュレーション応用 #3

(使用製品: Maestro, Glide, Prime, LigPrep, SiteMap 等)

単一のドッキング計算とそれに必要な準備や得られた結果の解析に関するツールと連携させて、様々な形での計算ワークフローに組み込んだ機能も搭載されており、これらのワークフローの利用方法を紹介し、実際の操作を体験していただきます。

- ・ Virtual Screening Workflow
- ・ クロスドッキング
- ・ 構造調製とドッキング計算の準備と実行までのワークフロー

* Maestro 基礎・ドッキングシミュレーション基礎 #1, 2・応用 #1, 2 コース・コマンドライン操作基礎コースへの事前参加を推奨

13. 2024年6月5日(水): コマンドライン操作応用

(使用製品: Maestro, Glide, Prime 等)

他のコースで紹介した Maestro 上の GUI 操作で設定・開始する計算機能についてコマンドラインから実行する方法を体験していただくとともに、製品群に Built-in で含まれる utilities コマンドや Python Scripts について汎用性の高いものをいくつか紹介します。

- ・ 各種計算機能のコマンドラインからの設定・実行方法
- ・ utilities コマンド、Built-in Python Scripts の利用例

* Maestro 基礎・コマンドライン操作基礎コースへの事前参加を推奨

14. 2024年6月11日(火): 分子動力学シミュレーション基礎

(使用製品: Maestro, Desmond)

トロンピンとマクロサイクル化合物の複合体を対象として、Maestro と Desmond を用いた MD 計算のモデル生成、計算実行、及び主要な解析機能の操作を体験していただきます。

- ・ MD シミュレーション向けの Protein Preparation
- ・ 水和モデルの生成
- ・ シミュレーションの実行
- ・ シミュレーション計算結果の解析 (Maestro or python script)

* Maestro 基礎・コマンドライン操作基礎コースへの事前参加を推奨

* LinuxOS 環境による操作を推奨

15. 2024年6月12日(水): 分子動力学シミュレーション応用

(使用製品: Maestro, Desmond)

引き続きトロンピンとマクロサイクル化合物の複合体を対象として、Enhanced sampling によるサンプリングの効率化や mixed-solvent MD を用いた druggability 評価等の操作を体験していただきます。

- ・ レプリカ交換 MD を用いた結合ポーズの探索タンパク
- ・ Binding-Pose Metadynamics による結合ポーズの安定性評価
- ・ mixed-solvent MD によるタンパク表面の druggability 評価
- ・ metadynamics を活用した水中におけるマクロサイクル化合物の効率的な配座探索
- ・ 各手法の背景理論の解説

* Maestro 基礎・コマンドライン操作基礎・分子動力学シミュレーション基礎コースへの事前参加を推奨

* LinuxOS 環境による操作を推奨

16. 2024年6月18日(火): QSAR/QSPR・クラスタリング解析

(使用製品: Maestro, Canvas, AutoQSAR, QikProp 等)

統計手法を用いた QSAR/QSPR 解析を行うためのいくつかのツールを説明し、必要な操作を体験していただきます。統計解析の入力データとしても利用できる記述子の生成機能やクラスタリング機能についての紹介も含めた内容としています。

- ・ 各種記述子生成
- ・ クラスタリング機能
- ・ 統計手法を用いた QSAR/QSPR 解析

* Maestro 基礎コースの事前参加を推奨

17. 2024年6月19日(水): Maestro usability and customization

(使用製品: Maestro)

Maestro 基礎コースでは説明しきれなかった内容として、Maestro 上での処理をより便利に行うためのキーボードショートカットを含めた操作方法や、定型的な処理実行のための機能やそれらを用いた Maestro のカスタマイズについて紹介します。

- ・ Menu Shortcuts
- ・ Command Script Editor
- ・ Function Key Macros

* Maestro 基礎コースへの事前参加を推奨

【参加費】

無料

【定員】

なし

【お申込みにあたってのお願いと注意事項】

- ・ 各コースとも実習用に期間限定のライセンスファイルを準備・提供いたしますので、ご自宅等のご契約場所以外でもご参加いただけます。
- ・ 当日はソフトウェア起動に関するサポートのお時間はとれませんので、該当のソフトウェアが起動できる状態でご参加ください。(閲覧のみの方は除く)
- ・ ご参加後にはアンケートにご協力いただければ幸いです。アンケートはコースごとに準備・案内させていただきます。その中には他の開催日を含めてレコーディング視聴したいコースを問う設問を含めてあります。1つのアンケート回答に対してレコーディング視聴を希望されるコース1つをお選びいただけますので、ご参加されたコースの再視聴やご都合が合わなかったコースの自習のためにご活用ください。

* 日本語での開催となります。All courses are only in Japanese.

* ご質問、ご不明な点がございましたらフッターに示されてある連絡先までお問い合わせください。