

CSD ケンブリッジ結晶構造データベース利用講習会

Workshop for The Cambridge Structural Database

CSD は、The Cambridge Crystallographic Data Centre (CCDC) が運営する世界最大の有機低分子の結晶構造データベースです。CSD-System、CSD-Enterprise (CSD-Discovery + CSD-Materials) の機能や活用法を学ぶ初心者向けの講習会を東京と大阪で開催いたします。CCDC スタッフによる英語での講義となります。

東京会場：2016年12月13日（火）化学情報協会（最寄：JR/地下鉄 駒込駅）

大阪会場：2016年12月15日（木）大阪大学 蛋白質研究所（吹田キャンパス）

第1部 10:00-14:45（講師：Amy Sarjeant）

1. CSD-System, CSD-Enterprise の基本構成の説明とデモ
2. PC を用いた実習（2時間程度）
 - ConQuest を使って類似低分子を探す
 - リード化合物を探す
 - Mogul を使った低分子配座の解析
 - CSD 内の低分子の分子間相互作用の検索
 - 蛋白質に結合したリガンドの構造を理解する

第2部 15:00-17:00（講師：Ilenia Giangreco）

3. CSD-Discovery の説明とデモ
 - Structure-based drug design のための GOLD
 - 分子間相互作用の傾向をみる
 - Ligand-based drug design ワークフロー
(Conformer generator, Ligand overlay and Ligand screener)

受講対象：企業およびアカデミックの研究者

参加費：無料（事前登録が必要です）

定員：30名程度

申込締切：2016年12月6日（火）

問合・申込先：化学情報協会 tel: 03-5978-3622

桜井 尋海 (crystal@jaici.or.jp) までご連絡ください。申込方法をお知らせいたします。

主催：

一般社団法人 化学情報協会

大阪大学 蛋白質研究所

世話人：

大阪大学 蛋白質研究所 土屋 裕子

〒565-0871 大阪府吹田市山田丘 3-2

tel: 06-6879-4311

e-mail: tsuchiya@protein.osaka-u.ac.jp