

CSD ケンブリッジ結晶構造データベース利用講習会 2016

Workshop for the Cambridge Structural Database

共催：化学情報協会，大阪大学蛋白質研究所

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 がリリースされてから、昨年で 50 周年を迎えました。CCDC では、CSD に蓄積された構造情報を基に医薬分子の設計に注目した製品開発を行っています。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下記の日程で開催いたします。

【東京会場】

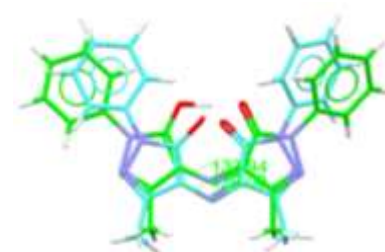
日時：2016年12月13日(火) 10:00 - 17:00

会場：化学情報協会講習会室 (東京都文京区)

【大阪会場】

日時：2016年12月15日(木) 10:00 - 17:00

会場：大阪大学蛋白質研究所本館講堂 (吹田キャンパス)



----- プログラム -----

9:45 - 10:00 : 受付

【第1部】10:05 - 14:45 CSD の講演と実習

"Using the Cambridge Structural Database (CSD) for Drug Discovery"

by Dr Amy Sarjeant, CCDC Inc. (USA)

The Cambridge Structural Database (CSD) includes crystal structure data for over 850,000 compounds. The structural information contained in this vast repository can be used to provide insight into many aspects of the drug discovery process. This hands-on workshop will demonstrate a variety of tools in the CSD-System which can be used to inform drug discovery and design, including:

Presentation: Introduction to the CCDC and CSD-Enterprise

Hands-on Tutorials

1. ConQuest: Searching for similar molecules
2. ConQuest: Finding new leads or fragments for scaffold replacement
3. Mercury: Investigating and analysing intermolecular interactions

12:45 頃～ <昼食> 各自でおとりください

4. Mogul: Analysing the structure of a protein-bound ligand
5. Mogul: Investigating the relationship between activity and conformational preference
6. FIM: Understanding polymorph stability using 3D Full Interaction Mapping

[FIM: 企業向けには CSD-Discovery または CSD-Materials へのアップグレードが必要]

【第2部】15:00-17:00 CSD-Discovery に含まれるツールの講演とデモ

"CSD-Discovery: Knowledge-driven solutions for life science research"

by Ilenia Giangreco, CCDC (UK)

CSD-Discovery provides valuable insights from high quality experimental crystal structure data for life science researchers. It combines the CCDC's extensive discovery chemistry expertise with the wealth of experimental data in the CSD. Knowledge derived from CSD data is highly relevant to drug discovery since the small molecule crystal structures in the CSD, including FDA approved drugs and drug-like molecules, display the geometry and interactions observed in protein-ligand complexes. Powerful analysis and visualization capabilities help researchers understand the impact of chemical modifications on conformation, interactions and properties of potential drug molecules. This workshop will provide attendees with an overview of the CSD-Discovery capabilities, including:

1. Protein-ligand docking using GOLD [with demo] :

Structure based Drug Design でおなじみの GOLD について

2. Ligand-based Drug Design のための Ligand-based Virtual Screening (LBVS) workflow

3. Conformer Generator [with demo] : 結晶構造の情報を使って conformer を発生させる

4. Ligand Overlay [with demo] : 同じターゲットに対し、複数 ligand を flexible overlay

5. Field-based Ligand Screener : LBVS で化合物ライブラリから potential new hit を探す

6. SuperStar/Full Interaction Map : 分子周辺の相互作用を mapping

★お手数をおかけいたしますが、アンケートへのご回答をお願い申し上げます。ご質問やトライアルを希望される方は、アンケートに回答時、お知らせください。



東京会場「お知らせ」

- ・ PC 部屋を出た控室の飲み物は、ご自由にお取りください。
- ・ 男性用トイレは、PC 部屋を出て左にございます(左右に2つ)。
- ・ 女性用トイレは、3階にございます(大会議室に入ってください、右側)
- ・ 配付資料と当日のスライドの内容が異なる場合がございますが、ご了承ください。
- ・ 本ビルは禁煙のため、喫煙ルームは設けておりません。申し訳ございません。

大阪会場「お知らせ」

- ・ 講堂内、free Wifi の利用が可能です。アクセスコードは別途お知らせいたします。
- ・ 昼食を持参された方は、休憩室または講堂にてお取りいただけます。
- ・ 配付資料と当日のスライドの内容が異なる場合がございますが、ご了承ください。
- ・ 本館内、喫煙は設けておりません。申し訳ございません。

ご意見・ご要望などございましたら、下記までお知らせください。

化学情報協会 科学データ情報室 桜井<crystal@jaici.or.jp>