

生物分子动力学模拟讲习班(NAMD 分子动力学模拟软件 Workshop)

为了提升生物分子动力学模拟的基础研究水平以及解决实际生物学问题能力，由 NAMD 软件研发团队成员 UIUC/CNRS 的 Chris Chipot 教授 (<http://www.ks.uiuc.edu/~chipot/>), 佐治亚理工大学 JC Gumbart 教授 (<http://simbac.gatech.edu/>) 和英国伦敦国王学院 Edina Rosta 博士 (<https://www.kcl.ac.uk/nms/depts/chemistry/people/core/rostaedina.aspx>, 2013 年诺贝尔化学奖 Arieh Warshel 的学生) 主讲。兹拟定于 7 月 9-13 号在中科院大连化物所举办为期 5 天的讲习班，欢迎感兴趣的同事和同学们踊跃参加。本次讲习班涵盖基本原理-应用研究实例-解答实际问题。上午讲授基本原理+研究实例，下午就参加者遇到或提出的具体科学问题进行研讨和现场答疑及技术指导。

第一天-MD principles, forcefield introduction, enhanced sampling and free energy simulation techniques (Prof. Chris, JC) 分子动力学模拟的基本原理、概念和技术

第二天-NAMD/VMD software introduction, advanced usage and customized development (Prof. Chris, JC) NAMD/VMD 软件的介绍、使用以及定制开发高级技巧

第三天-Computational drug discovery including protein structure prediction, forcefield development for small molecules and binding affinity computation using non-pbsa methods (Prof. Chris, JC) 蛋白质分子识别的应用研究，包括结构预测、小分子力场开发以及亲和力计算

第四天-Modeling of membrane proteins, MDFF for Cryo-EM and their functional mechanism (Prof. JC Gumbart) 膜蛋白结构、动态学与功能机理的应用研究

第五天-Modeling enzyme catalysis and protein engineering (Dr. Edina Rosta) 酶催化机理研究

注册费 3500 元，包括 5 天的茶歇和午餐，住宿自理。报名加 QQ 群 (131510708) 或扫描 QQ 群二维码。



报名表(填好之后请发至下面前 qq 邮箱)

开票信息	单位名称				
	纳税人识别号	或统一社会信用代码:			
	地址、电话				
	开户行及账号				
学员基本资料	学员姓名	学校/学院	职务/职称	联系电话(手机)	E-mail

联系人: 张鼎林 联系电话: 0411-84379875

手机: 15542303551

会务邮箱: namd2018@qq.com