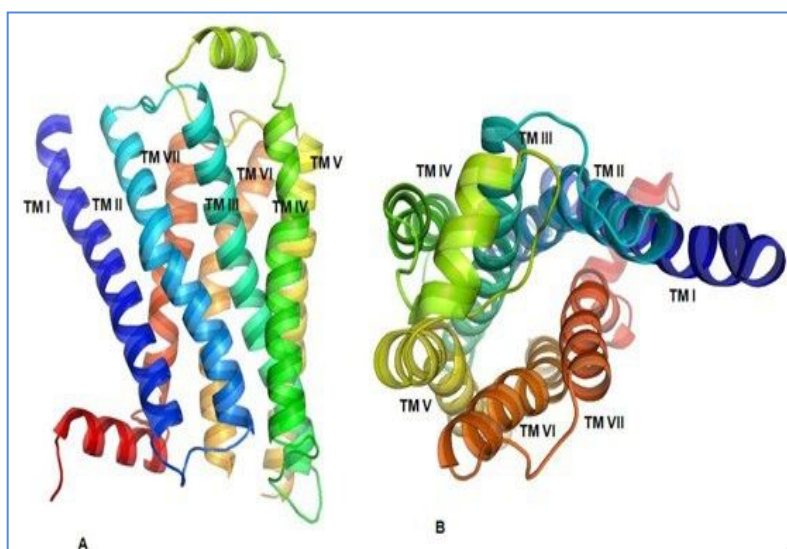


中药新药筛选虚拟仿真实验

利用药物合成中间体和中药新药筛选平台将进行创新药物设计,针对某一个特定的药物作用靶标,利用该靶标来设计药物,然后进行药物合成实验,有利于药物合成得到有药效的创新药物;同时,通过基于受体结构(又称为分子对接)、基于配体结构(又称药效团)筛选方法,并通过筛选进行结构修饰得到创新药物,闯出一条中药新药研发的新思路,平台的建设,将极大提升学生的创新和思维能力,为帮助学生形成良好的科研思维,进一步提升中心培养学生实践创新能力奠定坚实的基础。



Discovery studio 3.5 虚拟仿真软件

中药新药筛选虚拟仿真实验可开展的实训试验项目表

编号	项目名称
1	小分子配体的准备及蛋白质文件的初始处理
2	Libdock 分子对接技术操作简介-胸苷激酶的分子对接对接操作
3	构建具有活性预测能力的药效团 (Hypogen) 简介-ACE 抑制剂的优化
4	CDOCKER 分子对接技术操作简介-人体睾丸血管紧张素 I 型转化酶的分子对接对接