

## KURSPROGRAMM

### DIENSTAG, 27. FEBRUAR 2018

- » Kraftfelder und Konformationsanalyse
- » Theoretische Docking-Grundlagen
- » Mittagspause
- » Molekülvisualisierung mit Chimera
- » Für Docking wichtige Funktionen in Chimera
- » Lokalisierung von Binderegionen in Proteinen

### MITTWOCH, 28. FEBRUAR 2018

- » Manuelles Setup zum Docking ausgewählter Moleküle
- » Ligand-Datenbanken
- » Mittagspause
- » Visualisierung/Analyse der gedockten Komplexe
- » Theoretische Grundlagen zum Virtual Screening
- » Setup eines Virtual Screening Projektes

### DONNERSTAG, 1. MÄRZ 2018

- » Analyse der VS-Ergebnisse
- » Anwendung von Docking-Diensten im Web
- » Mittagspause
- » Alternative Scoring-Funktionen
- » Protein-Protein-Docking

Die Sessions gliedern sich in der Regel in einen theoretischen und einen praktischen Teil, wobei grundlegende Techniken zunächst Hands-on vorgeführt und danach selbständig angewandt werden können. Es bleibt genügend Zeit für individuelle Hilfestellung und die Beantwortung von Fragen. Für jeden Teilnehmer steht ein eigener Arbeitsplatz zur Verfügung.

(Änderungen vorbehalten)

## HINWEISE FÜR TEILNEHMER

### VERANSTALTUNGSORT

Computer-Chemie-Centrum der Universität Erlangen-Nürnberg  
Nägelsbachstraße 25  
91052 Erlangen

### KURSABLAUF

Beginn: Dienstag, 27.02.2018, 9:00 Uhr

Ende: Donnerstag, 01.03.2018, 16:00 Uhr

Es besteht die Möglichkeit zum Mittagessen in nahegelegenen Restaurants und Cafes.

### ANMELDUNG

Melden Sie sich online, mit unserem Anmeldeformular oder ganz einfach und formlos per E-Mail an:

DECHEMA-Forschungsinstitut  
Weiterbildung  
Postfach 170352  
D-60077 Frankfurt am Main

Tel.: +49 69 7564-253/202  
Fax: +49 69 7564-414  
E-Mail: [gruss@dechema.de](mailto:gruss@dechema.de)  
E-Mail: [weber-heun@dechema.de](mailto:weber-heun@dechema.de)  
Internet: <http://dechema-dfi.de/kurse>

Aufgrund der umfangreichen Vorbereitungen ist eine Anmeldung bis spätestens 02.02.2018 erwünscht.

Die Weiterbildungskurse werden vom DECHEMA-Forschungsinstitut, eine Stiftung bürgerlichen Rechts, in Kooperation mit der DECHEMA Gesellschaft für Chemische Technik und Biotechnologie e.V. angeboten.

### KURSGEBÜHR

inkl. Kursunterlagen, Teilnahmezertifikat, Get-together und Pausengetränke

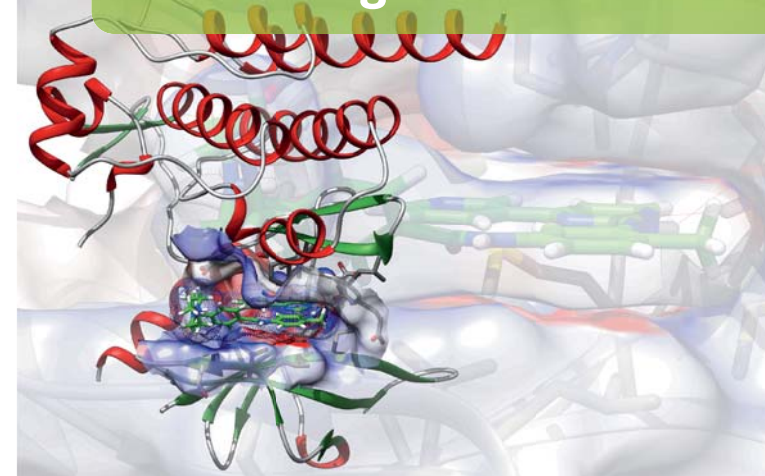
995,- €  
980,- € (persönliche DECHEMA-Mitglieder)

Die Teilnehmerzahl ist auf 12 begrenzt.

## WEITERBILDUNGSKURS

27. Februar - 1. März 2018  
Erlangen

# Protein-Ligand Docking und Virtual Screening für Einsteiger



## MODELLIERUNG VON PROTEINSTRUKTUREN UND DEREN INTERAKTIONEN

Im Hinblick auf steigende Kosten sowie experimentellen Aufwand gewinnt der Einsatz theoretischer Verfahren besonders in der pharmazeutischen und medizinisch-technischen Chemie zunehmend an Bedeutung. Aufgrund der Fülle der mittlerweile zur Verfügung stehenden Software für die verschiedensten Einsatzgebiete ist eine Spezialisierung auf Teilbereiche fast unumgänglich. Dabei wird oft zwischen Anwendungen für makroskopische Systeme (z.B. Proteine oder DNS) bzw. für kleine Moleküle (organische und anorganische Verbindungen) unterschieden. Die Zielsetzung dieses Kurses ist es beide, dem Anschein nach gegensätzliche, Welten miteinander zu verknüpfen.

Trotz der in den letzten Jahren geleisteten Fortschritte stellt die korrekte Beschreibung von Protein-Ligand-Interaktionen, also das so genannte Docking-Problem, immer noch eine große Herausforderung an die Theorie dar. Die Gründe hierfür sind vielfältig: die Flexibilität der Interaktionspartner, die große Zahl zu berücksichtigender Freiheitsgrade, Schwierigkeiten bei der energetischen Quantifizierung der Interaktion, oder die Anforderung, extrem viele Moleküle testen zu müssen, machen das Docking zu einer echten Herausforderung.

Den Teilnehmern dieses Kurses wird ein Überblick über aktuell in der Forschung verwendete theoretische Konzepte und Lösungsoptionen zur Beschreibung der Interaktion biologischer Makromoleküle mit kleinen organischen Verbindungen gegeben. Dabei wird der Schwerpunkt auf die Behandlung von globulären Proteinstrukturen als makroskopischer Interaktionspartner gelegt. Wir werden versuchen, für eine Proteinstruktur potentielle Bindetaschen für einen Liganden und innerhalb dieser dessen wahrscheinlichste Orientierung und Konformation zu finden. Die Einflüsse unterschiedlicher Bewertungsfunktionen auf die Resultate unserer Docking-Ansätze werden untersucht. Insgesamt kommt dabei der Visualisierung der Komplexgeometrien und ihrer Oberflächen eine besondere Bedeutung zu. Ein weiterer Schwerpunkt des Kurses liegt in der automatisierten Behandlung einer großen Zahl möglicher Liganden in Form eines virtuellen high-throughput Screenings einer zu erstellenden Substanzbibliothek. Es werden hierzu Möglichkeiten vorgestellt, wie man auf einfache Art und Weise eine Vielzahl von Berechnungen automatisiert vorbereiten, durchführen und analysieren lassen kann.

## LERNZIEL

Nach Abschluss des Kurses sollen die Teilnehmer in der Lage sein

- » sich Informationen rund um eine bekannte Proteinstruktur aus dem Internet beschaffen zu können
- » für eine Proteinstruktur potentielle Ligandbindetaschen zu lokalisieren
- » die Proteinstruktur mit ihren wichtigsten Eigenschaften zu visualisieren
- » ein kleines organisches Molekül in eine Bindetasche zu docken
- » den resultierenden Komplex über verschiedene Scoring-Funktionen zu bewerten und anschaulich zu visualisieren
- » zu erkennen, welche spezifischen Interaktionen für eine gute Ligandbindung verantwortlich sind oder diese verhindern
- » eine Datenbank für ein Screening vieler Liganden zu generieren
- » ein virtuelles Screening zu planen und durchzuführen
- » die erhaltenen Ergebnisse eines Screenings aufzubereiten und zu analysieren
- » das erworbene Wissen selbständig und gezielt zu erweitern sowie auf eigene Fragestellungen anzuwenden.

## STOFFVERMITTLUNG

Der Stoff wird in Vorträgen mit der Möglichkeit zur Diskussion vermittelt. Es werden praktische Übungen an persönlichen Arbeitsplatzrechnern durchgeführt, wobei die Teilnehmer die vorgestellten Methoden und ausgewählte Programme zunächst unter Anleitung anwenden und dann, falls gewünscht, einfache Aufgaben selbständig lösen können.

## ZIELGRUPPE

Naturwissenschaftler, Chemiker, Biologen, Mediziner, Biotechnologen und Pharmazeuten in Forschung und Entwicklung.

Abgesehen von Computergrundlagen und elementarsten Grundlagen über den Aufbau biologischer Makromoleküle sind keine besonderen Vorkenntnisse erforderlich.

## KURSUNTERLAGEN

Jeder Kursteilnehmer erhält zu Beginn der Veranstaltung einen Ordner mit den Folien der Vorträge sowie zusätzlichen Materialien zu den Demonstrationen und Fallbeispielen.

## KURSLEITUNG

PD Dr. Harald Lanig  
Zentralinstitut für Scientific Computing (ZISC)  
Universität Erlangen-Nürnberg  
E-Mail: harald.lanig@fau.de

## VORTRAGENDE

PD Dr. Harald Lanig

Apotheker Jonas Kaindl

## RAHMENPROGRAMM

Am Dienstag gemeinsames Abendessen in einer fränkischen Gaststätte, zu dem die Teilnehmer eingeladen sind.

|

**Brief-/Fax-Antwort**  
**(Fax-Nr.: +49 69 7564-414)**

**DECHEMA-Forschungsinstitut**  
Weiterbildung  
Postfach 17 03 52  
**D-60077 Frankfurt am Main**

**Anmeldung** für den DECHEMA-Kurs 7186 vom 27.02. - 01.03.2018  
**“Protein-Ligand Docking und Virtual Screening für Einsteiger”** in Erlangen

Anmeldeschluss: 02.02.2018

Die Anmeldungen werden entsprechend der Reihenfolge des Eingangs berücksichtigt.

---

**Veranstaltungsteilnehmer**

Frau  Herr  Titel \_\_\_\_\_

Name \_\_\_\_\_ Vorname \_\_\_\_\_

Firma \_\_\_\_\_

Abteilung \_\_\_\_\_

Straße/Postfach \_\_\_\_\_

PLZ/Ort \_\_\_\_\_

Telefon/Fax \_\_\_\_\_ E-Mail \_\_\_\_\_

Ich bin persönliches DECHEMA-Mitglied  ja  nein

**Abweichende Rechnungsanschrift**

Firma \_\_\_\_\_

Abteilung \_\_\_\_\_

Straße/Postfach \_\_\_\_\_

PLZ/Ort \_\_\_\_\_

Die Kursgebühr beträgt 995,- € / 980,- € (persönliche DECHEMA-Mitglieder). Wird eine Anmeldung mindestens zwei Wochen vor Kursbeginn storniert, erfolgt Erstattung der Teilnehmergebühr abzüglich 10 % für Verwaltungskosten. Bei Stornierung zu einem späteren Termin ist eine Erstattung nicht mehr möglich. Unsere Teilnehmergebühren unterliegen nicht der Umsatzsteuerpflicht (Steuerbefreiung nach § 4.22 UStG).

Mit der Anmeldung akzeptieren Sie unsere allgemeinen Geschäftsbedingungen. Diese finden Sie im Internet unter <http://dechema-dfi.de/agb> oder Sie können sie beim Weiterbildungssekretariat der DECHEMA anfordern.

\_\_\_\_\_  
Ort, Datum

\_\_\_\_\_  
Unterschrift und Firmenstempel