|  |  |
| --- | --- |
| 项目编号 | 2022-JK15-W1271 |
| 货物名称 | 多肽药物计算机辅助设计程序及工作站 |
| 数量 | 1 | □国产 ☑进口 |
| 最高投标限价 | 人民币： 95.00万元 |
| **设备功能要求** |
| 药物的先导化合物的识别、设计与优化，药物分子构建和显示，分析生物大分子和有机小分子的结构模型，药物与靶标相互作用关系研究，对药物分子的虚拟筛选，对已有的药物分子改造，进行创新的片段药物设计，进行Me Too Me Better 药物设计，从头药物设计，基于结构的片段药物设计，基于化学反应的原位生长方法的药物设计，基于骨架跃迁的药物设计，基于药效团的先导化合物的发现，基于药效团的化合物的改造和设计，构建基于结构的药效团模型，基于受体-配体复合物的药效团模型，基于2D-QSAR和3D-QSAR的药物设计和筛选及优化方法，药物SAR（构效关系）的研究，构建及优化组合化合物库，化合物ADMET/毒性性质预测, 蛋白/核酸的序列分析、蛋白进化分析、蛋白质三维结构的预测与模拟、蛋白质结构表面电荷分析及pKa值预测、膜蛋白的结构预测与模拟、抗体的设计与分析、蛋白理性设计、虚拟氨基酸突变、二硫键预测、丙氨酸扫描、饱和突变、核酸的设计与模拟、蛋白（核酸）-蛋白（核酸）相互作用、X-ray晶体结构解析、药物靶点的识别等。多肽药物设计、优化、多肽同源模建、多肽蛋白相互作用等分析。 |
| **软硬件配置清单** |
| **序号** | **描 述** | **数量** |
| 1 | MOE （Molecular Operating Environment分子操作环境软件 | 1套 |
| 2 | StarDrop小分子化合物数据分析工具软件 | 1套 |
| 3 | 配套工作站 | 1台 |
| 4 | 配套终端 | 2台 |
| 5 | 虚拟筛选项目服务 | 2项 |
| **技术参数要求** |
| 序号 | 指标名称 | 技术参数 |
| 1 | 核心软件 | ★提供软件1个科研license的10年服务期；★并提供相应的20个教学license。 |
| 1.1 | 可视化功能 | ★可视化客户端；**＃**3D 显示功能模块，用户可以通过普通显示器或投影仪观察分子结构以及相互作用。 |
| 1.2 | 分子构建与搜索 | ★多类型分子构建功能；★多种分子构象搜索方法；**＃**可以针对饱和环进行构象搜索。 |
| 1.3 | 分子力学计算 | ★支持多种力场，可分别适用于小分子、大分子、复合物、简化蛋白等多种情形的力场优化，提供分子动力学模拟；支持第三方动力学计算引擎的接口；**＃**支持相对结合自由能计算，动力学轨迹分析；支持半经验量化MOPAC计算。 |
| 1.4 | QSAR功能 | ★能计算不少于600种化学分子描述符；提供定量构效关系方法，包括2D QSAR和3D QSAR建模；**＃**提供基于网页端的配体SAR分析，包括MMP分析等 |
| 1.5 | 药效团功能 | **＃**提供基于配体、基于“配体-蛋白”复合物和基于受体的药效团建模 |
| 1.6 | 分子对接功能 | ★支持分子对接，包括蛋白-小分子共价对接、蛋白-蛋白对接；**＃**支持基于3D-RISM算法的水分子位置分析及预测功能；可以提供第三方对接工具例如FlexX和Gold的接口。 |
| 1.7 | 蛋白质建模 | ★支持单位建模，包括多模板融合建模、诱导契合建模、多聚体建模；基于知识的方法或从头建模方法来进行loop建模。 |
| 1.6 | 多肽设计 | ★支持非天然氨基酸残基的模拟以及多肽设计 |
| 1.7 | 蛋白设计及属性计算 | ★交互式的基于蛋白结构的分子设计及优化功能；**＃**支持pH依赖的蛋白质属性计算和分析；提供蛋白残基旋变异构体分析及突变功能，蛋白质设计功能，以及蛋白质沉聚分析、翻译后修饰位点预测等 |
| 1.8 | 支持性 | ★跨平台支持Windows、Linux、Mac等主流平台与操作系统，并且同时支持64位和32位系统；★后台语言公开，可以用SVL语言进行模块的客户化定制和开发。 |
| 2 | 核心软件 | ★提供软件1个科研license 10年服务期。 |
| 2.1 | 可视化功能 | ★可视化客户端以及分子显示功能，支持Windows、Mac等主流平台与操作系统。 |
| 2.2 | ADME属性预测 | ★提供多个ADME性质的预测模型 |
| 2.3 | 成药性综合评价 | **＃**可对小分子的多个成药性参数进行综合评分，以获得各项属性均衡的化合物。 |
| 2.4 | 数据展示 | **＃**支持使用表格、卡片、浏览视图对大量分子及其性质、活性数据进行方便的查看 |
| 3 | 配套运行工作站 | ★CPU：2.1G 20核40线程及以上**＃**内存：128G**＃**硬盘：512G+4T；★显卡：RTX3090 |
| 4 | 配套运行终端 | ★CPU：I7内存：16G；硬盘：512G |
| 5 | 虚拟筛选项目服务 | **＃**提供2个虚筛服务项目，分别针对指定的一个靶标蛋白，通过计算机辅助药物设计方法筛选出一批与靶标蛋白有潜在结合能力的化合物，并根据化合物的各项属性进行综合评价。 |

说明: 功能要求、配置清单为必备要求，从功能角度提出；技术参数体现设备档次要求，参数中区分“★”、“＃”参数，其中“★”参数为核心参数，为必须满足参数；“＃”参数为重要参数，在采购评审中分值较高。一般技术指标参数不作标记。投标人须提供所有技术参数的支持资料，包括但不限于生产商公开发布的资料（含生产商出具的产品规格表、产品宣传彩页、技术白皮书、制造商官方网站发布的产品信息、说明书等或检测机构出具的检测报告等）。并在技术参数偏离表注明支持材料在标书中的页码并显著标记，凡未提供有效证明文件的响应不予认可。