## “化合物库”采购意向公开

为了便于供应商及时了解JD采购信息，根据《JD物资服务集中采购需求管理暂行办法》等有关规定，现将“化合物库”采购意向公开如下：

|  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 序号 | 采购项目名称 | 需求概况 | 初步技术  参数 | 预算金额  （万元） | 预计采购时间 | 备注 |
| 1 | 化合物库 | 为快速发现高效针对病毒靶点的小分子化合物需采购《药物筛选软件》一套；《药物功能重定位库》一套。 | 1、药物筛选软件  多种分子构建功能：支持各种类型分子的构建，涵盖小分子、大分子和复合物等多种应用场景。  分子构象搜索：支持多种分子构象搜索方法，特别针对饱和环的构象搜索优化。  蛋白同源模建：支持多模板融合建模和诱导契合建模，并能够进行蛋白，抗体等多聚体建模。  蛋白结构分析：能够分析蛋白质结构中的几何参数（如键长、键角、二面角）及内部残基相互作用。  ★药效团建模：提供基于配体、复合物和受体的药效团建模功能。  ★结合口袋预测：支持预测orthosteric（内源性）及allosteric（变构）口袋。  ★电子轨道演示：针对小分子，能提供其电子轨道的3D演示。大蛋白也可以，只是需要更强的计算设备。  ★分子对接：支持蛋白-小分子共价对接、蛋白-蛋白对接，并提供第三方对接工具的接口拓展。  氨基酸贡献分解：利用最新的算法，基于分子对接的结果进行蛋白质氨基酸能量贡献的分解，这样可以针对氨基酸进行小分子/大蛋白设计。  ★抗体-抗原等大蛋白PPI对接表面分析：能基于蛋白-蛋白对接表面进行分析及筛选重要氨基酸，进行人源化设计，单点突变及序列改造。  ★分子/蛋白可视化与交互：可在手机/HoloLens等设备可视化展示分子结构，包括原子、键合物、链条、残基等多种分子元素。支持分子模型的旋转、缩放和平移操作，支持触控和语音指令交互。提供药物点和口袋点的可视化展示，包括药物组合和口袋组合的批量渲染。  可视化设备支持：支持普通显示器或投影仪展示3D分子结构及相互作用，兼容多种输入设备。  物联网任务：支持从用户动设备（如手机）/穿戴式设备（如HoloLens）提交任务，到用户指定的匹配服务器上进行运行，运行后结果返回用户设备进行三维演示。  基于结构的药物设计：提供交互式分子设计和优化功能，结合自由能、应力能和物化参数，设计高活性和生物利用度的分子。  模块化设计：集成FPocket和Pharmit模块，用于蛋白-配体相互作用分析和口袋点检测。支持C#开发的多线程任务管理和外部模块封装，能够扩展IDock模块进行对接计算。内置CurvedUI、Magic等第三方插件，支持复杂粒子效果和虚拟操纵杆操作。  第三方软件接口：支持与多种第三方软件的无缝对接，增强工作流程的灵活性。  GPU加速：支持GPU加速，提升计算效率。  穿戴式设备（如HoloLens）或移动设备（如手机）场景管理与持久化：内置场景锚点管理器，支持场景的自动记录与重定位，跨环境实现场景持久化渲染。  丰富的用户界面组件：支持基于GIF和曲线UI的互动操作。支持登录、口袋检测、对接操作和QR码扫描等UI面板的互动功能。  跨平台支持：支持Windows、HoloLens、PC、iOS和Android平台的发布和运行。  扩展性：后台语言公开，支持C#模块的定制开发，便于用户进行二次开发。  用户组件/模块更新：用户可以选择跟新新的模块及功能。支持跨平台项目的导入和导出，方便应用程序的分发。  2、药物功能重定位库  2.1不少于5200种全球上市药物和临床药物，可用于高通量筛选和高内涵筛选，以及老药新用、新的药物靶点筛选和细胞诱导等研究方向。  2.2库中的上市化合物，均需表标明具体的上市来源，如FDA、EMA、NMPA等权威部门审批或收录在USP、EP、BP、JP、CP等药典文献中；库中的临床期药物分子均提供临床阶段与适应症信息。  2.3涵盖多个研究领域。肿瘤相关药物不低于1100个、心血管药物相关药物不低于400个、抗炎/免疫相关药物不低于600个、神经系统相关药物不低于700个、抗感染相关分子不低于500个，呼吸系统相关药物不低于250个等。  2.4包括5-HT Receptor、Sodium Channel、p38 MAPK、PI3K、MEK等，覆盖的信号通路不低于30条。  2.5 FDA批准的药物分子不低于1700个；处于临床期的分子不低于3000个。  2.6不包含无机盐、造影剂、防晒剂等无活性的分子。  2.7提供详细的说明书，包含化合物结构、靶点信息、适应症信息、活性描述等。  2.8提供NMR、HPLC/LCMS等多种检测技术，保证产品结构正确，纯度不低于98%。  2.9超过2000种不同结构类型，具有较好的结构代表性。后续具备提供同系列衍生物和类似物的能力。  2.10提供包装量不低于1mg粉末。 | 50 | 2024年10月 |  |

注：1.本次公开的采购意向仅作为供应商了解初步采购安排的参考，采购项目具体情况以最终发布的采购公告和采购文件为准；2.供应商对本次公示建设内容存在合理化建议，以及推荐产品或技术参数的，请以电子邮件方式向我部反馈（附合理理由或证明材料）。

联系人：王老师，15223268898

邮箱地址：35552187@qq.com

驻渝某部

2024年09月18日