**薛定谔药物设计软件软件及配备服务器性能需求**

**一、软件性能需求**

一．详细配置要求

1. 18tokens库，有效期5年含5年软件升级。包含以下模块: ConfGen, Core Hopping, Epik, Field-based QSAR, Glide,Jaguar, Jaguar pKa, LigPrep, MacroModel, Membrane Permeability, P450 SOM Prediction, Phase, Shape Screening, Prime, QikProp, QSite, SiteMap

2. 一个DESMOND GPU license，有效期5年含5年软件升级。

3. 50个Maestro 界面license，有效期5年含5年软件升级。

二．主要技术指标

1. 提供药物靶标结构模建功能，模建时序列比对需提供Blast和PSI-Blast两种方法，蛋白家族认证时使用HMMER/Pfam方法。软件在确定模版时可以考虑家族信息。靶标Loop区预测采用从头预测的方法，至少可预测14个氨基酸长度；

2. 动力学功能能在GPU上运行，并提供随机动力学和分子动力学两种优化方法。软件提供Amber，Amber94，MM2，MM3，MMFF，MMFFs，OPLS，OPLS\_AA；

3. 提供以下算法评价靶标蛋白结构的合理区和不合理区：RamachandranPlot；PeptidePlanarity；StericClashes；BondLengthDeviations；BondAngleDeviations；BackboneDihedrals；SidechainDihedrals；G-factorSummary；AverageB-factors；GammaAtomB-factors；SidechainPlanarity；ImproperTorsions；C-alphaStereochemistry；MissingAtoms；

4. 对接模块，针对靶标结构可以实现高通量虚拟筛选，在虚拟筛选过程中，根据时间和精度的需要，软件提供三种对接模式：最快的模式可以2秒筛选一个配体；中等精度模式可30秒筛选一个配体；最高精度模式可5-10分钟筛选一个配体。软件在虚拟筛选时可以加入配体性质过滤器，过滤器可以是分子量、反应官能团、ADME性质等，将不符合条件的配体从库中排除。虚拟筛选时的限制条件可以加入药效团信息。对接时要求打分函数包含靶标活性位点疏水面的计算，既可以考虑熵的变化也考虑焓的变化。软件在虚拟筛选时能预测反应官能团而有效发现结果中的假阳性。

**5.** 软件在对接中可以考虑配体分子对靶标结构的诱导契合(induced-fit)模式，配体进入活性位点以后，软件采用全新预测的方式来预测配体存在的情况下活性位点的构象的改变，可以考虑两种构象改变：靶标活性位点相邻两个原子180度的几何翻转和靶标活性位点相邻两个氨基酸残基180度的几何翻转；

6. 软件提供工具构建配体分子，配体分子应包括有机化合物、肽、核酸或者多糖分子；

7. 软件提供共价对接功能；

8. 软件可以根据靶标配体的结构和活性生成药效团；

9. 软件可以根据靶标配体的形状生成药效团，软件能够根据配体活性构象空间立体结构的形状生成药效团，可以利用形状药效团进行3D结构数据库筛选找到活性分子，并且该功能可以在GPU上运行；

10. 可以预测药物靶标配体的ADME性质预测，能够在对接过程中，对整个数据库，或者单个分子计算ADME性质。计算的ADME性质包含反应官能团（引起对接结果的假阳性和生物体内毒性问题）、药物针对中枢神经系统的活性、药物封闭HERG K+通道的IC50值、药物的血脑屏障及血脑屏障模型MDCK细胞的渗透性；药物的皮肤渗透性、可能的代谢反应的数量、药物和人的血清白蛋白的结合能力、口服药物的吸收性、药物从皮肤吸收到血液的最大渗透率等等；

11. 可以对药物靶标分子活性位点反应机理进行研究，提供QM/MM的方法研究靶标活性位点的反应机理，在反应机理研究中保证靶标结构的完整，并对靶标的活性位点采用QM方法，蛋白其他部分采用MM方法；

12. 提供基于力场的QSAR模型计算功能；

13. 提供母核跃迁功能改造小分子化合物；

14. 提供基于物理的被动膜渗透性的准确预测功能。

15. 提供预测细胞色素P450的代谢位点的功能。

16. 提供基于结构的药效基团方法，可用于快速筛选数百万种化合物，从而获得了基于配体和结构的药物设计方法的优势。

17. 软件基本操作界面（用户图形界面）可以同时打开50个界面；

18. 所有软件功能必须在统一图形操作界面下运行，要求提供5年的软件使用权限，并且包含5年的软件升级；

三. 售后服务要求

1. 承诺所提供的“薛定谔软件”为进口原装全新货物，满足合同要求的配置。到货后提供软件在线安装和软件的使用指导。

2. 从licenses生效之日起，免费提供5年内的软件升级。

3. 从licenses生效之日起的5年内，软件开发商负责免费提供技术支持，软件使用过程中遇到的任何问题，接到用户问题报告后，在48小时内给予响应。响应的方式包含电话，电子邮件，网络会议。

**二、服务器性能需求（1台）**

CPU Intel酷睿i9 10980XE 18C36T 3.0GHz或以上，；主板:双路 GPU 或以上工作站主板；内存:8个32G DDR4 3200或以上；固态硬盘:2个 4TB 2.5 SSD或以上；显卡：2个Ampere架构的RTX A5000显卡或以上；电源：1250W或以上；机箱：全塔式工作站机箱。