

Załącznik nr 1 Specyfikacja techniczna

Nazwa oprogramowania:	Oprogramowanie wspomagające proces projektowania leków
Termin obowiązywania licencji:	12 miesięcy
Liczba licencji:	2
Specyfikacja techniczna	
<p>Zintegrowany system wspierający proces projektowania leków z możliwością zdalnego dostępu o następującej funkcjonalności:</p> <ol style="list-style-type: none">1. Możliwość szacowania i wizualizacji ΔG, w oparciu o co najmniej dwie siły: desolvatacji i oddziaływań typu wiązanie wodorowe.2. „Scaffold hopping system” (system skanowania analogów), który umożliwia co najmniej zmianę centralnego elementu ligandu i generowanie odpowiednich modeli analogów 3D.3. Dostęp do modeli 3D farmakoforów i możliwość wykorzystania fragmentów pochodzących z bazy PDB oraz ZINC.4. System optymalizacji hitów umożliwiający wzrost fragmentów wewnątrz kieszeni wiążących oraz łączenie fragmentów w modelu 3D.5. Wizualny system umożliwiający analizę statystyczną i ocenę prawdopodobieństwa występowania dla danych kątów dwuściennych.6. System do wykrywania kieszeni wiążących wraz z funkcją szacowania jakości danej kieszeni i jej wizualizacją.7. Molekularny system dokowania (umieszczenia ligandu w miejscu wiązania) w tym opartego na szablonie poprzez określenie maksymalnej wspólnej podstruktury (MCS) lub na podstawie podobnego wyniku.	