

关于药物靶标蛋白结构分析系统采购项目 市场需求调查报告(进口产品)

一、采购项目基本情况

本项目资金来源于财政拨款。

福建中医药大学是福建省重点建设高校，福建省“一流大学”建设高校，是福建省人民政府、国家中医药管理局共建高校。为了充分发挥培养中医药人才的作用，急需配备相应的进口医疗设备以满足科研课题和教学计划，故申请采购进口设备药物靶标蛋白结构分析系统。

该项目建设部门为药学院，该仪器主要用于药物靶标蛋白结构样品的制备和和结构分析，包括分子对接、分子模拟、靶点设计、配体设计能量计算等，也包括网络药理的构建与预测分析和大组学数据的智能处理和靶向药物制剂发现，是目前中药和药学学科亟需建设设备，也是目前药学院新增中药学一级学科博士点建设的急需设备，但目前校内、福州大学城地区均无相关设备。

二、采购需求调查

1. 采购项目需求标准及依据

福建中医药大学是福建省重点建设高校，福建省“一流大学”建设高校，是福建省人民政府、国家中医药管理局共建高校。为了充分发挥培养中医药人才的作用，急需配备相应的进口医疗设备以满足科研课题和教学计划，故申请采购

进口设备药物靶标蛋白结构分析系统。

该项目建设部门为药学院，药学院拥有中药学、药学两个一级学科，具有中药学一级学科博士点，依托国家级平台国家发改委闽台中药生物技术国家地方联合工程研究中心，学院正全力推进药学、中药学学科建设，不断提高科研能力条件建设，提高药学、中药学的科技创新和服务能力，为福建医药发展做出努力和贡献。

近年来，随着人工智能技术和生物医药技术的迅速发展，药物靶标预测与设计已成为药物研发中的关键环节。通过对药物靶蛋白进行预测和分析，可以更高效地预测药物靶点、优化药物分子设计、加速药物筛选过程，并深入理解药物的作用机制。目前，药学院已建成药物靶标蛋白检测系统，能够寻找潜在的药物靶点并评估药物治疗效果。学院也已在药物靶标预测领域取得了一定的研究进展，尤其是在中药靶标发现方面，在国际上首次提出“中药靶向降解组学”的概念和技术，用于中药靶蛋白的发现，相关成果已在国际著名期刊如《Acta Pharmaceutica Sinica B》等发表了一系列高水平论文。2022年以来，学院在药物靶标研究方面已发表JCR 1区论文60余篇，其中影响因子>10的论文达5篇。

然而，尽管在药物靶标发现的研究方面取得了一定成果，但在实际应用中，尤其是基于药物靶标蛋白结构分析系统构建方面，学院仍缺乏必要的硬件设备支持。征询学院中

药学和药学学科建设、中药博士点建设发展卡脖子的平台建设问题，梳理现有相关教学科研项目（包括国家自然科学基金区域联合基金重点项目等 17 项）和研究团队，均涉及药物靶标的预测和设计研究，主要功能包括药物靶标蛋白配体的分子对接、分子模拟、靶点设计、配体设计和能量计算等，也包括网络药理的构建与预测分析和大组学数据智能处理，创新靶向药物制剂发现等，并且随着 2020 国家药审中心新的新药政策的执行，对新药的靶标（机理讲的清）提出更高的要求，药物靶标设计与预测，已经成为中药新药研发的重要技术手段。并且药物靶标蛋白结构的研究也是目前中药、药学学科基础研究、中药新药研发的重要技术手段。此外，教学主要是研究生的药学实验方法与技术课程、机器学习与多组学技术、中药化学生物学与结构药理学的理论章节涉及该设备，但是课程实践缺乏设备实训。

表 1 科研项目需求情况表

课题来源	类别	课题名称	具体需求
国家自然科学基金联合基金重点项目	国家级	基于结构药理学和靶向降解组学的闽台道地中药抗结直肠癌的药效物质基础及作用靶点研究	利用药物靶标蛋白结构分析系统对闽台道地中药的作用靶点进行解析
福建省卫健委	中青年科研重大项目	盐肤木药效物质及作用靶点的基础研究	利用药物靶标蛋白结构分析系统对盐肤木作用靶点进行结构分析研究
中央引导地方科技发展专项	国家级备案	珍稀濒危特色中药三叶青种苗繁育及产业化关键技术研究	利用药物靶标蛋白结构分析系统对三叶青种质糖基转移酶等进行结构分析
中央引导地方科技发展	国家级备	福建特色中药现代化关键技术研究	利用该设备开展福建特色药材活性成分的作用靶标

专项	案		和作用靶点数据库建立
国家自然科学基金	国家级	柴胡皂苷 D (SaikosaponinD) 靶向 STAT3 发挥抗类风湿性关节炎作用的研究	利用该设备研究药物靶标蛋白 STAT3 结构及网络药理作用
国家自然科学基金	国家级	黄芩新素抑制 STAT3-改善肿瘤微环境免疫抑制的机制研究	基于 STAT3 研究黄芩新素配体的作用靶点结构
国家自然科学基金	国家级	疏水性低共熔溶剂对麻黄生物碱的提取方法及提取原理研究	利用该设备对麻黄生物碱进行提取模型预测和计算
国家自然科学基金	国家级	基于 HMGB1/PRDXs/NF- κ B 炎症反应网络研究片仔癀抗缺血性脑卒中的药效物质及作用机制	利用该设备进行片仔癀抗脑卒中组学分析研究
国家自然科学基金	国家级	红景天苷调控 BDNF/TrkB 通路和补体 C3a/C3aR 通路对缺血性脑卒中神经干细胞增殖并定向分化为神经细胞的影响	利用该设备筛选 BDNF/TrkB 通路和补体 C3a/C3aR 通路的配体的结构以及互作模式
国家自然科学基金	国家级	基于可调控金属有机框架材料-毛细管电泳联用技术的动物药蛋白多肽成分质量控制体系构建	利用该设备进行多肽成分的单颗粒样品制备, 组学分享研究
国家自然科学基金	国家级	豆科紫荆亚科的时空演化研究	利用该设备进行豆科紫荆亚科演化组学分析研究
国家自然科学基金	国家级	绞股蓝皂苷糖基转移酶的高通量筛选及其合成人参皂苷的应用探索	利用该设备进行绞股蓝皂苷糖基转移酶的样品制备, 结构分析与预测
国家自然科学基金	国家级	共载藤黄酸和顺铂的二硫化钼纳米输送系统构建及其用于肺癌诊疗一体化研究	利用该设备进行藤黄酸和顺铂的二硫化钼的结构分析
国家自然科学基金	国家级	基于自噬-氧化应激“交叉对话”动态关联“毒效差异”的益母草调控急性肾损伤“异证异理”的机制	利用该设备进行益母草的调控急性肾损伤的靶标蛋白结构分析
国家自然科学基金	国家级	基于 TGF- β 通路研究红景天苷调控缺血性脑卒中小胶质细胞和神经细胞 crosstalk 对轴突发芽的影响	用于 TGF- β 蛋白靶点结构分析及网络互作构架
国家自然科学基金	国家级	从自噬-NLRP3 炎症小体途径探讨片仔癀对急性肝炎和脑梗死“异病同治”的药效物质及作用机制	用于自噬-NLRP3 炎症小体的结构分析
国家自然科学基金	国家级	基于化学生物学技术研究盐肤木通过调控 STAT3 靶点抗冠心病的药效物质和作用机制	用于 STAT3 靶点抗冠心病的蛋白样品制备及靶点蛋白结构分析

经查阅学校设备清单, 发现, 福建中医药大学目前尚无药物靶标蛋白结构分析系统相关设备, 也无同类替代设备。进一步查阅福建省大型仪器共享网设备, 省内目前同类设备仅厦门大学有 2 套 (300kV 冷冻透射电镜配套和 120Kv 透射电镜配套), 用于病毒疫苗蛋白结构研究, 福州大学城地区

尚无相关设备。由于药物靶标预测研究仅依赖于外部计算资源或商业软件，无法满足个性化、定制化的中药靶标预测需求，且外送计算费用高昂，数据安全无法保障，限制了研究的深度和广度。因此，学院亟需采购一套先进的药物靶标蛋白结构分析系统，以进一步推动中药学和药学学科的发展。

药学院相关课题组已经在国际著名期刊如《Science》、《Acta Pharmaceutica Sinica B》等发表系列论文，近年学院也先后引进的多位青年骨干人才和高层次人才，包括来自中科院大连化物所等药物靶标蛋白结构分析研究人才8人，课题组李华教授，从国外布朗大学博士、西南医学研究中心博士后期间，也一直从事药物靶标蛋白结构分析，课题组已经积累丰富的化学生物学和药物靶标预测与设计的理论和实践，能够专职负责管理该设备。

因此购买高端的药物靶标蛋白结构分析系统及其平台构建成为中药学、药学学科进一步发展的必要技术手段，也是在原有研究水平上突破顶级研究成果CNS论文成果的重要支撑，并为中药、药学创新药的研发奠定基础，因此提出采购建设药物靶标蛋白结构分析系统。

该进口设备主要功能包括用于药物靶标蛋白结构样品制备和结构分析，包括蛋白样品制备、结构分子对接、分子模拟、靶点设计、配体设计能量计算等，也包括网络药理的构建与预测分析和大组学数据智能处理和创新靶向药物制

剂发现等，是靶点研究的共性设备，可以满足医学、中医学、药学、中药学等多个学科研究需要。其核心技术参数依托于该设备在蛋白单颗粒样品的制备基础上，通过整体双精度浮点（FP64）蛋白计算性能达 187 TFLOPS 或以上，整体显存容量达到 1024GB 或以上；可以实现蛋白配体的分子对接、分子模拟、靶点设计、配体设计和能量计算的 AI 训练和推理：支持 AI 训练和预测推理应用；支持多种蛋白配体深度学习框架（包括 TensorFlow、PyTorch 等）下的各种模型，包括大型的 Transformer 架构模型，支持面向分子对接、分子模拟、靶点设计、配体设计和能量计算的模型量化、剪枝等优化技术；支持在不显著降低推理精度的前提下，减少模型的计算量和内存占用，提高配体筛选推理速度，支持 High Available 功能，可以实时评估蛋白样品图像质量。也是目前国际主流研究采用的技术参数，在结构分析算力参数上，也是国际 SCI 论文和国内卓越期刊论文研究报道占比最高的设备。

该进口设备核心模块是蛋白结构单颗粒制备系统及其相关算力分析软件，目前蛋白结构单颗粒制备系统主要有国际品牌赛默飞 Thermo Fisher Vitrobot Mark IV、德国徕卡 Leica GP2、和美国科扬 Gatan Cryoplunge 3，而目前国产的蛋白结构单颗粒制备系统以中镜科仪为主，进口产品和国内产品的区别在于：样品制备过程，玻璃化会形成一种样品

结构几乎没有损伤的非晶态固体，对于需要通过迅速降低样品温度来避免周围水分子结晶的细胞和结构生物学研究来说，蛋白结构分析样品制备技术至关重要。因而要求仪器在自动化（样品冷冻过程全自动化）、高通量（吸干动作次数最大值 16 次）、可重复性、高质量（软件精确控制参数）等方面涉及多项技术专利，具有国产设备不可替代性。如中镜科仪样品制备国产设备，无法实现全自动化、高质量的冷冻样品制备，且实验不具有可重复性，因此目前国内尚无仪器能满足这些要求。

另外在结构分析方面，进口设备支持多种深度学习框架（包括 TensorFlow、PyTorch 等）下的各种模型，包括大型的 Transformer 架构模型，而国产现有设备还缺乏结构分析的深度学习模型，此外，进口设备还支持智能的资源分配和管理策略，能够根据不同推理任务的优先级和资源需求，动态分配 CPU、GPU、内存等资源，确保高优先级任务得到及时处理，同时提高蛋白结构分析算力的整体资源利用率。而国产设备也尚无相关核心功能，无法解决结构分析的自动处理和筛选、鉴定。

目前本校尚无药物靶标蛋白结构分析系统设备，该设备建设可明显改善学校中药学、药学学科、中药博士点建设和教学科研条件，同时也能促进学校中西医、中医学等相关主要学科条件，及基础医学、化学、生物学等多学科共性需求

设备，提升学校教学、科研条件。综上所述，特申请采购进口产品。

2. 采购项目国内产业发展、市场供给、历史成交情况、升级更新、备品备件、耗材等情况。

1) 采购项目国内产业发展

该进口设备主要功能包括用于药物靶标蛋白结构样品制备和结构分析，包括蛋白样品制备、结构分子对接、分子模拟、靶点设计、配体设计能量计算等，也包括网络药理构建与预测分析和大组学数据智能处理和创新靶向药物制剂发现等，是靶点研究的共性设备，可以满足医学、中医学、药学、中药学等多个学科研究需要。其核心技术参数依托于该设备在蛋白单颗粒样品的制备基础上，通过整体双精度浮点（FP64）蛋白计算性能达 187 TFLOPS 或以上，整体显存容量达到 1024GB 或以上；可以实现蛋白配体的分子对接、分子模拟、靶点设计、配体设计和能量计算的 AI 训练和推理：支持 AI 训练和预测推理应用；支持多种蛋白配体深度学习框架（包括 TensorFlow、PyTorch 等）下的各种模型，包括大型的 Transformer 架构模型，支持面向分子对接、分子模拟、靶点设计、配体设计和能量计算的模型量化、剪枝等优化技术；支持在不显著降低推理精度的前提下，减少模型的计算量和内存占用，提高配体筛选推理速度，支持 High Available 功能，可以实时评估蛋白样品图像质量。

也是目前国际主流研究采用的技术参数，在结构分析算力参数上，也是国际 SCI 论文和国内卓越期刊论文研究报道占比最高的设备。

该进口设备核心模块是蛋白结构单颗粒制备系统及其相关算力分析软件，目前蛋白结构单颗粒制备系统主要有国际品牌赛默飞 Thermo Fisher Vitrobot Mark IV、德国徕卡 Leica GP2、和美国科扬 Gatan Cryoplunge 3，而目前国产的蛋白结构单颗粒制备系统以中镜科仪为主，进口产品和国内产品的区别在于：样品制备过程，玻璃化会形成一种样品结构几乎没有损伤的非晶态固体，对于需要通过迅速降低样品温度来避免周围水分子结晶的细胞和结构生物学研究来说，蛋白结构分析样品制备技术至关重要。因而要求仪器在自动化（样品冷冻过程全自动化）、高通量（吸干动作次数最大值 16 次）、可重复性、高质量（软件精确控制参数）等方面涉及多项技术专利，具有国产设备不可替代性。如中镜科仪样品制备国产设备，无法实现全自动化、高质量的冷冻样品制备，且实验不具有可重复性，因此目前国内尚无仪器能满足这些要求。

另外在结构分析方面，进口设备支持多种深度学习框架（包括 TensorFlow、PyTorch 等）下的各种模型，包括大型的 Transformer 架构模型，而国产现有设备还缺乏结构分析的深度学习模型，此外，进口设备还支持智能的资源分配和

管理策略，能够根据不同推理任务的优先级和资源需求，动态分配 CPU、GPU、内存等资源，确保高优先级任务得到及时处理，同时提高蛋白结构分析算力的整体资源利用率。而国产设备也尚无相关核心功能，无法解决结构分析的自动处理和筛选、鉴定。

国产品牌中只有北京中镜科仪技术有限公司具有样本制备环节相关设备，并且也具有部分相关配件供应，相关产品主要是配合进口产品进行部分替代使用，整体方案尚不成熟，并且也缺乏相关结构分析的高算力配套软件

2) 市场供给

省内目前同类设备仅厦门大学生科院和公共卫生学院各有 1 套。

据了解，市场上药物靶标蛋白结构分析系统品牌主要有 3 个：赛默飞 Thermo Fisher Vitrobot Mark IV、德国徕卡 Leica GP2、和美国科扬 Gatan Cryoplunge 3，经咨询结合市场情况调研就仪器配置、型号、规格、售后服务等方面，进行调研，赛默飞 Thermo Fisher Vitrobot Mark IV、德国徕卡 Leica GP2、和美国科扬 Gatan Cryoplunge 3 的药物靶标蛋白结构分析系统其市场占有率（参考 SCI 论文发表率）分别为 80%、10%、8%，其中占比最多的是赛默飞 Thermo Fisher Vitrobot Mark IV。

3) 同类采购项目历史成交信息

(1) 赛默飞 Thermo Fisher Vitrobot Mark IV 品牌中标价调研：

①2022 年，中国疾病预防控制中心公共卫生创新计划项目购买冷冻电镜共计 8988.8 万，其中药物靶标蛋白结构分析系统（制样+数据分析部分）共计 305 万元；

②2024 年，南京医科大学疫苗平台项目冷冻电镜设备采购项目，共计 7288.6 万，其中高配药物靶标蛋白结构分析系统达到 2043.50 万元；

③湖北工业大学冷冻电镜配套设备购置项目，药物靶标蛋白结构分析系统达到 1478.66 万元；

④北京农学院重点教学科研平台设备更新项目，药物靶标蛋白结构分析系统达到 1442 万元；

(2) 科扬国际贸易(上海)有限公司 Gatan 品牌中标价调研：

①2018 年，南方科技大学 “冷冻电镜项目二期采购”项目，采购 Gatan 冷冻电镜项目，包括电镜 965 万，样品制备 89.8 万和探测器分析 198 万，药物靶标蛋白结构分析系统部分共计 287.8 万元；

②2024 年，南方科技大学的药物靶标蛋白结构分析系统部分更新维保 Gatan 267.7 万元；

(3) 徕卡 GP2 品牌中标价调研：

①2018 年南方科技大学 “冷冻电镜项目二期采购”项目，采购徕卡 GP2 药物蛋白结构分析系统，样品制备各个组件价格分别为 91 万，67.2 万和分析系统 144 万，共计 302.2

万元。

②2021 年，西安交通大学冷冻电镜制样设备，徕卡 GP2 样品制备中标价格为 398.86 万元。

③2022 年复旦大学冷冻电镜样品制备升级设备项目，共计 979.8350 万。

4) 升级更新、备品备件、耗材等情况

后期软件免费终生升级，无相关耗材试剂。

三、需求调查过程

(一) 国产品牌调查

项目名称	药物靶标蛋白结构分析系统采购
调查人员	李华、许文、刘梦茜、丰迪生、王文义
调查对象	北京中镜科仪技术有限公司
调查时间	2024 年 12 月 10 日
调查地点	南方科技大学冷冻电镜中心
调查方式	实地调查、调研汇报、咨询

通过对国产品牌供应商调研，对北京中镜科仪技术有限公司的药物靶标蛋白结构分析系统进行实地调查和咨询，在国产品牌中只有北京中镜科仪技术有限公司具有样本制备环节相关设备，并且也具有部分相关配件供应，相关产品主要是配合进口产品进行部分替代使用，湿度控制和自动化程度等整体方案尚不成熟，并且也缺乏相关结构分析的高算力配套软件，因此在国产设备调研的基础上，进一步调研进口设备情况。

（二）进口品牌调查

项目名称	药物靶标蛋白结构分析系统采购
调查人员	李华、许文、刘梦茜、丰迪生、王文义
调查对象	赛默飞世尔科技公司，徕卡公司，Gatan 公司
调查时间	2024 年 12 月 10 日
调查地点	南方科技大学冷冻电镜中心
调查方式	实地调查、调研汇报、专家论证

通过对市场主流品牌、配置、价格、服务等方面进行调研：进口设备主要功能包括用于药物靶标蛋白结构样品制备和结构分析，包括蛋白样品制备、结构分子对接、分子模拟、靶点设计、配体设计能量计算等，也包括网络药理的构建与预测分析和大组学数据智能处理和创新靶向药物制剂发现等，是靶点研究的共性设备，可以满足医学、中医学、药学、中药学等多个学科研究需要。其核心技术参数依托于该设备在蛋白单颗粒样品的制备基础上，通过整体双精度浮点（FP64）蛋白计算性能达 187 TFLOPS 或以上，整体显存容量达到 1024GB 或以上；可以实现蛋白配体的分子对接、分子模拟、靶点设计、配体设计和能量计算的 AI 训练和推理：支持 AI 训练和预测推理应用；支持多种蛋白配体深度学习框架（包括 TensorFlow、PyTorch 等）下的各种模型，包括大型的 Transformer 架构模型，支持面向分子对接、分子模拟、靶点设计、配体设计和能量计算的模型量化、剪枝

等优化技术；支持在不显著降低推理精度的前提下，减少模型的计算量和内存占用，提高配体筛选推理速度，支持 High Available 功能，可以实时评估蛋白样品图像质量。也是目前国际主流研究采用的技术参数，在结构分析算力参数上，也是国际 SCI 论文和国内卓越期刊论文研究报道占比最高的设备。

该进口设备核心模块是蛋白结构单颗粒制备系统及其相关算力分析软件，目前蛋白结构单颗粒制备系统主要有国际品牌赛默飞 Thermo Fisher Vitrobot Mark IV、德国徕卡 Leica GP2、和美国科扬 Gatan Cryoplunge 3，进口产品和国内产品的区别在于：样品制备过程，玻璃化会形成一种样品结构几乎没有损伤的非晶态固体，对于需要通过迅速降低样品温度来避免周围水分子结晶的细胞和结构生物学研究来说，蛋白结构分析样品制备技术至关重要。因而要求仪器在自动化（样品冷冻过程全自动化）、高通量（吸干动作次数最大值 16 次）、可重复性、高质量（软件精确控制参数）等方面涉及多项技术专利，具有国产设备不可替代性。如中镜科仪样品制备国产设备，无法实现全自动化、高质量的冷冻样品制备，且实验不具有可重复性，因此目前国内尚无仪器能满足这些要求。

另外在结构分析方面，进口设备支持多种深度学习框架（包括 TensorFlow、PyTorch 等）下的各种模型，包括大型

的 Transformer 架构模型，而国产现有设备还缺乏结构分析的深度学习模型，此外，进口设备还支持智能的资源分配和管理策略，能够根据不同推理任务的优先级和资源需求，动态分配 CPU、GPU、内存等资源，确保高优先级任务得到及时处理，同时提高蛋白结构分析算力的整体资源利用率。而国产设备也尚无相关核心功能，无法解决结构分析的自动处理和筛选、鉴定。

国产品牌中只有北京中镜科仪技术有限公司具有样本制备环节相关设备，并且也具有部分相关配件供应，相关产品主要是配合进口产品进行部分替代使用，湿度控制和自动化程度等整体方案尚不成熟，并且也缺乏相关结构分析的高算力配套软件。

综上所述，形成申请采购进口产品的需求意见。

附福建中医药大学设备采购论证专家意见：

药学院药物靶标蛋白结构分析系统采购项目

专家论证意见表

药学院药物靶标蛋白结构分析系统采购项目：

本次论证的药学院药物靶标蛋白结构分析系统符合福建中医药大学药学、中药学一级学科建设要求，有利于提升药学院中药学博士点建设水平，并可满足教学科研共性需求。仪器主要用于药物靶标蛋白结构分析，主要功能包括药物靶标蛋白配体的分子对接、分子模拟、靶点设计、配体设计和能量计算等。同时包括网络药理的构建与预测分析和组学数据处理，人工智能驱动的药物设计与发现、创新靶向药物制剂发现等。能更好的满足现代中药新药研发的要求，促进中药学、药学等学科的高质量发展，同时也为开展同类研究提供更好的科研条件保障。

此外，该设备也是医学、生物学、化学等学科基础研究的重要设备，纳入开放共享。建议考虑设备数据模块兼容性和可升级空间，并充分考虑设备的维保和售后服务。

综上，该资产配置合理，技术先进，具有必要性，建议立项。

专家签名：

修林 徐会存 童永强
曾建伟 杨敬

时间：2025年6月2日

五、调查结果承诺

承诺上述需求调查内容真实有效，无虚假情况，本单位对此报告内容的真实性负责。