

附件 2:

单一来源采购专家论证意见表

时间:2025年3月12日

主管单位	教育部
使用单位	北京大学
项目名称	高通量多样性筛选和表型筛选化合物库
项目金额（元）	¥1,120,299.375
专家论证意见	经论证，Enamine 公司提供的“高通量多样性筛选和表型筛选化合物库”符合核糖核酸北京研究中心的研究需求。本次采购计划中的产品基于 Enamine 独有数据库，涵盖 RNA 二级结构、tRNA 3D 折叠及 mRNA 非螺旋区域结合位点，并通过虚拟筛选精准覆盖 G-四链体、核糖开关等可成药 RNA 结构，其技术实现依赖 Enamine 专利的“RNA-配体 3D 药效团模型”及分子对接算法，国内无供应商具备同类 RNA 靶向库开发能力（国产库普遍局限于传统 DNA/蛋白靶点，RNA 注释覆盖率<5%，且分子量分布偏差>20%）；此外，该库面向多样性和表型筛选，并且其虚拟筛选数据整合了全球顶级实验室的 RNA 结构解析成果。 鉴于 Enamine 公司的高通量多样性筛选和表型筛选化合物库在化合物规模、质量、技术实现和靶点覆盖方面的独特优势，申请人选择 Enamine 作为单一来源具有充分的正当性。该化合物库不但完全符合本项目的技术需求，还将为核糖核酸北京研究中心在靶向 RNA 的小分子操控及其应用基础研究中提供不可替代的支持，助力在作物改良、抗病和疾病治疗领域的创新突破。该化合物库必须以单一来源方式采购。 专家姓名：陈功 职称：教授 工作单位：清华大学

附件 2:

单一来源采购专家论证意见表

时间:2025年3月12日

主管单位	教育部
使用单位	北京大学
项目名称	高通量多样性筛选和表型筛选化合物库
项目金额（元）	¥1,120,299.375
专家论证意见	经论证，Enamine 公司提供的“高通量多样性筛选和表型筛选化合物库”严格满足技术指标要求(含 84,000 种化合物，50 μL/10mM 预封装于 384 孔板，包含千余种已获批药物及其作用机制相似化合物 (T>85%、线性指纹匹配)。 此外，该化合物库中的分子基于 Enamine 与欧洲各大药企的独家合作成果，具有显著的结构新颖性和靶点覆盖优势。这对于核糖核酸北京研究中心开发靶向 RNA 的小分子药物至关重要，尤其是在以下领域： 1. 作物改良：通过筛选靶向 RNA 的小分子，优化作物的抗逆性、产量和品质。 2. 抗病研究：开发靶向病原体 RNA 的小分子抑制剂，增强作物的抗病能力。 3. 疾病治疗：筛选靶向癌症和神经退行性疾病相关 RNA 的小分子药物，推动相关疾病的治疗突破。 鉴于上述原因，认为本套设备（试剂）只能以单一来源的方式从 Enamine 公司采购。 专家姓名：方圣邴 职称：研究员 工作单位：中国科学院生物物理研究所

附件 2:

单一来源采购专家论证意见表

时间:2023年3月12日

主管单位	教育部
使用单位	北京大学
项目名称	高通量多样性筛选和表型筛选化合物库
项目金额(元)	¥1,120,299.375
专家论证意见	核糖核酸北京研究中心的核心任务之一是开发靶向 RNA 的小分子操控技术，以推动其在作物改良、抗病和疾病治疗（如癌症、神经退行性疾病）中的应用。Enamine 公司提供的“高通量多样性筛选和表型筛选化合物库”完全符合本项目的技术指标要求，具体如下： — 化合物规模与质量。库中包含约 84,000 种化合物，预置于 384 孔板（50 μL/10mM），确保高通量筛选的高效性和一致性。 — 结构多样性与靶向覆盖：库中化合物无单体，每簇含 3-5 个结构类似物，精准覆盖 PPI-like 分子 4 个、GPCR-like 结构 14 个、CNS-like 结构 34 个及激酶类分子 11,062 个，为 RNA 靶向研究提供了广泛的化学空间和靶点覆盖。 — 高纯度与可靠性：100%排除 PAINS 化合物，避免了泛筛选干扰分子的影响，确保筛选结果的准确性和可重复性。 此外 Enamine 公司的“高通量多样性筛选和表型筛选化合物库”展现了技术实现的独特性与不可替代性，具体如下： — 聚类算法：通过先进的聚类算法，确保化合物库的结构多样性和靶向覆盖能力，为 RNA 靶向研究提供了丰富的化学

资源。

- AI 辅助 PAINS 过滤系统：利用 AI 技术高效排除 PAINS 化合物，确保库中化合物的纯净性和成药性，为 RNA 靶向筛选提供了高质量的基础。
- 微升级分装工艺：确保化合物浓度偏差 $<15\%$ ，满足高通量筛选的精确性和一致性要求。相比之下，国产化合物库普遍存在 PAINS 残留、靶向分子覆盖率不足及孔板浓度偏差 $>15\%$ 等问题，无法满足核糖核酸北京研究中心的高标准要求。

鉴于上述原因，必须以单一来源方式采购，选定 Enamine 为供应商，并在合同中明确冷链运输、质量验收及数据更新条款以控制风险。

专家姓名：

李伟

职称：研究员

工作单位：中国科学院动物研究所