

附件 2:

单一来源采购专家论证意见表

时间: 2025 年 3 月 20 日

主管单位	教育部
使用单位	北京大学
项目名称	靶向 RNA 的化合物库
项目金额 (元)	¥734,642.95
专家论证意见	申请人从事核糖核酸-小分子互作的研究, 对于小分子化合物库的质量和通量有较高的要求。经过详细的论证, 认为 Life Chemicals 公司的“靶向 RNA 的多样性筛选化合物库”符合申请人的要求, 同时也满足核糖核酸北京研究中心对于“RNA 精准操控技术”, “农业作物的增产、抗病和改良”, 以及“神经退行性疾病和癌症领域的创新治疗方案”三大研究方向的要求。理由如下: 1. 靶向 RNA 的化合物库是经过严格筛选的高质量化合物库 该化合物库的构建始于从多个权威数据库 (如 SMMRNA、PDB、RBIND、FDA、NALDB、PubChem 和 ChEMBL) 中精选出约 750 个已知能与 RNA 结合的分子。通过剔除低亲和力 ($K_d > 10 \mu M$) 或低抑制活性 ($IC_{50} \leq 10 \mu M$) 的化合物, 确保了库中化合物的高效性和可靠性。 2. 靶向 RNA 的化合物库是基于 2D 相似性搜索的高多样性设计 采用 2D 相似性搜索技术, 以 Tanimoto 指数 ≥ 0.80 和 Tversky 指数 ≥ 0.85 为标准, 从 Life Chemicals HTS 化合物库中筛选出超过 40,000 个 RNA 抑制剂的类似物。这一过程不仅保证了化合物的多样性, 还通过片段指纹比对技术优化了结构相似性, 为筛选提供了更广泛的化学空间。

附件 2:

单一来源采购专家论证意见表

时间: 2025年3月20日

主管单位	教育部
使用单位	北京大学
项目名称	靶向 RNA 的化合物库
项目金额 (元)	¥734,642.95
专家论证意见	本次申请项目旨在帮助核糖核酸北京中心搭建高通量筛选平台, 该平台的部分工作将以核糖核酸为靶点, 进行新型药物的开发, 解决现代医学与农学应用领域重大问题。经过深入分析, Life Chemicals 公司的“靶向 RNA 的化合物库”在构建其多样性筛选化合物库时采用了独特的构建方法, 保证了其独特的 RNA 靶向筛选优势, 包括: 1. 高特异性: 基于已知 RNA 结合分子的严格筛选, 确保化合物对 RNA 的高亲和力和选择性。 2. 高多样性: 通过 2D 相似性搜索和化学多样性优化, 提供了广泛的化学空间, 适合多种 RNA 靶点的筛选。 3. 高质量: 通过多层次的化学过滤和药物化学优化, 确保化合物的纯净性和成药性。 这一系列构建方法和质控过程不仅提高了化合物库的质量, 还确保了其在药物发现中的应用潜力。因此, Life Chemicals 公司的化合物库在市场中具有显著的竞争优势。 鉴于上述原因, 认为本套设备 (试剂) 必须以单一来源的方式从 Life Chemicals 公司采购。 专家姓名: 陈明 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20日

主管单位	教育部
使用单位	北京大学
项目名称	靶向 RNA 的化合物库
项目金额(元)	¥734,642.95
专家论证意见	核糖核酸北京研究中心以核糖核酸作为研究目标,发展新的作物改良、抗病方法以及疾病治疗的手段。当前,大多数临床获批的小分子药物都以蛋白质为靶标。用小分子药物靶向核糖核酸,为调节由核糖核酸直接调控的众多细胞过程(如转录、剪接、翻译和表观遗传修饰)提供了新的机会,并且对于“不可成药”蛋白质靶点相关疾病提供了全新的治疗模式。 经仔细调研,Life Chemicals 公司所提供的小分子库展现了极大的新颖性和庞大的数量规模。该库涵盖了以 RNA 和 RNA 结合蛋白为靶标的多种筛选库子集,共计 31,076 个具有靶向核糖核酸潜能的小分子,其他供应商无法提供相同规模和质量的产品。这些小分子不仅丰富了高通量筛选平台现有的药物化学库,还为癌症和病毒性疾病提供了新的治疗思路,也为农作物的抗病和育种方面提供了新的操控技术。 鉴于上述原因,认定本套设备(试剂)必须以单一来源的方式从 Life Chemicals 公司采购。 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

	3. 靶向 RNA 的化合物库经过严格的化学过滤与优化 在筛选过程中，通过去除 PAINS（泛筛选干扰化合物）和含有反应性基团的分子，并应用内部开发的药物化学过滤器，进一步提升了化合物的质量和成药性。这种多层次的筛选策略确保了库中化合物的纯净性和实用性。 4. 靶向 RNA 的化合物库考虑到化学多样性与药物性质的平衡 在最终优化阶段，通过考虑化学多样性并结合主要生化性质和理化描述符，从 40,000 多个化合物中精选出超过 22,300 个类药性筛选化合物。这一过程不仅保证了库中化合物的多样性，还优化了其药物性质，使其更适合 RNA 靶向研究。 总结 综上，Life Chemicals 公司的靶向 RNA 的化合物库是 RNA 靶向研究领域的理想工具，其严格的筛选流程、高多样性的设计以及高质量的化合物组成，使其在 RNA 靶向药物发现、作物改良和疾病治疗研究中具有独特的优势。鉴于上述原因，认为本套设备（试剂）只能/必须以单一来源的方式从 Life Chemicals 公司采购。 专家姓名： 方显郁 职称：研究员 工作单位：中国科学院生物物理研究所
--	---