

“广西政府采购云平台” 合同编号：12N98502664R20262806

广西区政府采购

中医药人工智能研究中心软件授权服务采购 项目合同

采购项目编号：GXZC2026-C3-000713-GXCJ

采购计划编号：广西政采[2025]26604 号

采购人：广西中医药大学

成交供应商：源资信息科技（上海）有限公司

广西城建
合同

目录

第一条	合同标的	1
第二条	质量保证	2
第三条	权利保证	2
第四条	合同履行期限和验收	3
第五条	售后服务及培训	4
第六条	付款方式	4
第七条	履约保证金	4
第八条	税费	5
第九条	违约责任	5
第十条	不可抗力事件处理	6
第十一条	合同争议解决	6
第十二条	合同生效及其它	6
第十三条	合同的变更、终止与转让	6
第十四条	签订本合同依据	6
附件一：	竞标声明	8
附件二：	成交通知书	10
附件三：	售后服务承诺	11
附件四：	技术要求偏离表	16
附件五：	商务要求偏离表	29
附件六：	最终报价表	32
附件七：	履约保证金缴纳凭证	34

采购计划号：广西政采[2025]26604 号

合同编号：12N98502664R20262806

采购人（甲方）：广西中医药大学

供应商（乙方）：源资信息科技（上海）有限公司

项目名称：中医药人工智能研究中心软件授权服务采购项目

项目编号：GXZC2026-C3-000713-GXCJ

签订地点：南宁市青秀区五合大道 13 号

签订时间：2026 年 5 月 26 日

本合同为中小企业预留合同：（是）。

根据《中华人民共和国政府采购法》《中华人民共和国民法典》等法律、法规规定，按照磋商文件规定条款和乙方响应文件及其承诺，甲乙双方签订本合同。

第一条 合同标的

1、项目一览表

序号	标的名称	服务要求	数量及单位①	单价(元)②	单项合价(元) ③=①×②	备注
1	药物设计软件 授权服务	详见采购需求	1 套	596000.00	596000.00	品牌： Schrödinger
2	量子化学软件 授权服务	详见采购需求	1 套	106000.00	106000.00	品牌：Gaussian
3	第一性原理仿 真计算模拟软 件授权服务	详见采购需求	1 套	215000.00	215000.00	品牌：MedeA
4	FEP 软件授权 服务	详见采购需求	1 套	395000.00	395000.00	品牌：FLARE
人民币合计金额（大写）：壹佰叁拾壹万贰仟元整（¥1312000.00）						

服务期限：

1. 药物设计软件授权服务：授权 10 年，在授权期内，软件不限安装，并使用 Token 模式，给定数量的 Token 内可以进行多任务并发计算，提供 10 年的软件免费升级及免费技术支持。
2. 量子化学软件授权服务：永久授权；License 模式：LINUX/WINDOWS 各一套，不限连接数和并发数；软件升级及售后服务：提供 1 年的软件免费升级及免费技术支持。
3. 第一性原理仿真计算模拟软件授权服务：永久授权；License 模式：服务器端不限安装，不限连接数和并发数，绑定 6 个客户端；软件升级及售后服务：提供不少于 1 年的软件免费升级，永久免费技术支持。
4. FEP 软件授权服务：提供 Flare V11（型号 Flare Pro+）与 Flare FEP 软件的仅限学术用途、授权期限为 5 年（自授权生效之日起计算）。License 模式：绑定 1 台服务器，不限单机登陆连接数和并发数；软件升级及售后服务：授权有效期内软件免费升级及免费技术支持。

2、合同价应包含人工、运输、装卸、安装、调试、技术支持、售后服务、更新升级、税金和相关的服务所需要的一切费用，为实施本项目总报价。

第二条 质量保证

乙方所提供的服务及服务内容必须与响应文件承诺相一致，有国家强制性标准的，还必须符合国家强制性标准的规定，没有国家强制性标准但有其他强制性标准的，必须符合其他强制性标准的规定。

质保期：按国家有关产品“三包”规定执行“三包”，交付验收合格上线并通过终验之日起，各软件免费技术支持服务期限内享有免费质保服务。采购人每月对软件平台进行一次监督检查，乙方应承担所有检查相关费用。

第三条 权利保证

1、乙方应保证所提供服务在使用时不会侵犯任何第三方的著作权、专利权、商标权、工业设计权等知识产权及其他合法权利，且所有权、处分权等没有受到任何限制。

2、没有甲方事先书面同意，乙方不得将由甲方提供的有关合同或者任何合同条文、规格、计划、图纸、样品或者资料提供给与履行本合同无关的任何其他人。即使向履行本合同有关的人员提供，也应注意保密并限于履行合同的必需范围。乙方的保密义务持续有效，不因为本合同履行终止、解除或者无效而解除。

乙方及乙方工作人员对甲方及甲方患者应履行保密义务。如乙方及乙方服务人员因违反本条约定给甲方及甲方患者造成损失的，乙方应当承担相应的法律责任，并赔偿由此给甲方造成的一切损失。乙方对于保密信息的义务应延续至该等信息因合法的原因而成为公开信息。本保密条款

具有独立性，不受合同终止或解除的影响。若乙方违反保密义务，需赔偿甲方全部损失（包括间接损失）。

3. 甲方按照本合同规定付款给予乙方后，本合同所有项目之知识产权归甲方所有。乙方未经甲方书面同意，不得向第三方提供本合同涉及之项目样品及相关资料，否则甲方将向乙方追索由此而引起的直接或间接的经济损失。

4. 乙方以及乙方安排完成合同项目的工作人员，应当确保具备与本合同约定所要求相符合的资质与条件，具备相应的工作经验，乙方须完全符合并遵守本合同所涉及的相关法律、法规、规范性文件的规定，确保可以依法开展合同约定的事项。

第四条 合同履约期限和验收

1、合同履约期限：

(1) 药物设计软件授权服务:授权期限:授权 10 年; 在授权期内, 采用 License 模式: 软件不限安装, 并使用 Token 模式, 给定数量的 Token 内可以进行多任务并发计算; 提供 10 年的软件免费升级及免费技术支持。

(2) 量子化学软件授权服务:授权期限:永久授权; License 模式: LINUX/WINDOWS 各一套, 不限连接数和并发数; 软件升级及售后服务: 提供 1 年的软件免费升级及免费技术支持。

(3) 第一性原理仿真计算模拟软件授权服务:授权期限:永久授权; License 模式: 服务器端不限安装, 不限连接数和并发数, 绑定 6 个客户端; 软件升级及售后服务: 提供不少于 1 年的软件免费升级, 永久免费技术支持。

(4) FEP 软件授权服务:提供 Flare V11 (型号 Flare Pro+) 与 Flare FEP 软件的仅限学术用途、授权期限为 5 年 (自授权生效之日起计算)。License 模式: 绑定 1 台服务器, 不限单机登陆连接数和并发数; 软件升级及售后服务: 授权有效期内软件免费升级及免费技术支持。

交付地点: 广西中医药大学仙葫校区。

2、乙方应按响应文件的承诺向甲方提供相应的服务, 并提供所服务内容的相关技术资料。

3、乙方提供不符合响应文件和本合同规定的服务成果, 甲方有权拒绝接受。

4、乙方完成产品交付后应及时书面通知甲方进行验收, 甲方应在收到通知后 15 个工作日内进行验收。若乙方延迟履行, 须在 (7) 日内书面通知甲方, 甲方有权根据情况决定是否延长履行期限, 延长不自动发生, 甲方可拒绝延长并要求乙方支付违约金。验收合格后由甲乙双方签署验收单并加盖甲方公章, 甲乙双方各执一份。甲方签署的验收单并不免除乙方对标的物的质量保证责任, 甲方在使用标的物过程中, 存在质量问题的, 乙方应承担相应责任。

5、甲乙双方应按照《广西壮族自治区政府采购项目履约验收管理办法》、双方合同、响应文

件验收。

6、甲方在初步验收或者最终验收过程中如发现乙方提供的服务成果不满足响应文件及本合同规定的，可暂缓向乙方付款，直到乙方及时完善并提交相应的服务成果且经甲方验收合格后，方可办理付款，在上述情况下，甲方暂缓付款不视为违约。

7、甲方验收时以书面形式提出异议的，乙方应自收到甲方书面异议后五个工作日内及时予以解决，否则甲方有权不出具服务验收合格单。

第五条 售后服务及培训

1、乙方应按照国家有关法律法规和本合同所附的《售后服务方案》要求为甲方提供相应的售后服务。

2、甲方应提供必要测试条件（如场地、电源、水源等）。

3、乙方负责甲方有关人员的培训。培训时间、地点：根据甲方要求决定（如有）。

4、响应时间：成交供应商接到故障通知后在 2 小时内到达采购人指定现场；一般问题应在 8 小时内解决，重大问题或其他无法迅速解决的问题应在 48 小时内解决。提供 7×24 小时的电话、QQ 远程协助、现场支持或其他校方指定的方式的服务

5、售后服务技术人员要求：专职人员

6、质保期内对系统进行免费的原厂维护、系统运行维护服务、数据维护服务、在线技术支持、主动式服务、快速响应等服务。

第六条 付款方式

1、付款方式：本合同签订生效之日起 15 个工作日内，甲方向乙方支付合同总金额的 30%；待项目完成并经采购人验收合格后 15 个工作日内，甲方向乙方结清剩余 70%合同款项。

2、票据要求：每次付款前乙方必须按照合同要求提供真实、有效、合法的正式发票，并经甲方检查票据合格。一旦发现乙方提供虚假发票，除须向甲方补开合法发票外，还须向甲方支付发票票面金额一倍的违约金，且甲方有权终止合同，因终止合同而产生的一切损失均由乙方承担。如乙方未提供符合要求的发票前，甲方有权暂停付款且不视为违约。

3、本合同使用货币币制如未作特别说明均为人民币。

第七条 履约保证金

1、履约保证金金额：合同价款的 2%（即人民币：贰万陆仟贰佰肆拾元整（26240.00 元））。

2、履约保证金递交方式：银行转账、支票、汇票、本票或者金融、担保机构出具的保函等非现金方式。

3、履约保证金递交时间：自成交通知书发出之日起 25 日内（在签订合同前，乙方按合同价

款的 2%向甲方指定账户交纳履约保证金，否则不予办理合同签订）。

4、履约保证金退付方式、时间及条件：由乙方方向履约保证金收取单位提供《广西壮族自治区政府采购项目合同验收书》（详见桂财采（2015）22 号），保证金收取单位在收到合格材料后 5 个工作日内，扣减成交供应商赔偿金和其他应从乙方扣回的款项后，将履约金退给乙方。

履约保证金指定账户：采购人账户。

开户名称：广西中医药大学

开户银行：中国银行股份有限公司南宁市明秀东支行

银行账号：6210 5749 8215

第八条 税费

本合同执行中相关的一切税费均由乙方负担。

第九条 违约责任

1、除不可抗力原因外，乙方未按照合同规定的期限提供服务的，每逾期一天，甲方有权要求乙方按合同金额的 1%支付违约金。乙方逾期超过 60 天的，甲方有权单方解除本合同；造成甲方损失的，违约金不足以弥补甲方损失的，应继续承担赔偿责任。

2、乙方提供的服务如侵犯了第三方合法权益而引发的任何纠纷或者诉讼，均由乙方负责交涉并承担全部责任，乙方承担所有侵权相关费用，甲方不需负责或承担任何连带责任。如甲方承担赔偿责任后，可向乙方追偿。乙方应自收到甲方赔偿通知之日起 5 日内赔偿甲方损失。

3、若乙方逾期交付，每逾期一天按合同金额的 1%支付违约金。

4、乙方存在本合同约定的其它违约行为的，按合同金额 5%收取违约金，造成甲方损失的，应继续承担赔偿责任。

5、未经甲方书面同意，乙方不得转让本合同项下全部或部分义务或擅自更换项目负责人、核心技术人员，甲方有权要求乙方限期改正，逾期未改正的，甲方有权单方解除合同，由此产生的一切法律责任和经济损失均由乙方承担。

6. 乙方提供本合同所涉及的相关产品或者服务，均须符合国家、行业各项法律、法规以及标准规范，如存在多个标准规范的，以最高要求的标准规范为准；不符合前述标准的，视为乙方违约，按本条第 4 款承担违约责任。

7. 双方均应按协议约定履行，如违反本协议约定，违约方须赔偿由此给另一方造成的损失，包括直接的财产损失，以及因违约造成的可能产生的预期经济损失以及守约方为应对相关处罚、纠纷、诉讼支出的全部费用（包括但不限于守约方因此承担的处罚、赔偿责任、发生的当事人以及代理人差旅费、诉讼费、公告费、律师费、公证费、保全费、诉讼保全保险费、评估费、鉴定费及其

他损失等)。

第十条 不可抗力事件处理

1、在合同有效期内,任何一方因不可抗力事件导致不能履行合同,则合同履行期可延长,其延长期与不可抗力影响期相同。

2、不可抗力事件发生后,应立即通知对方,并寄送有关权威机构出具的证明。

3、不可抗力事件延续一百二十天以上,双方应通过友好协商,确定是否继续履行合同。

第十一条 合同争议解决

1、因服务质量问题发生争议的,应邀请国家认可的质量检测机构进行鉴定。服务符合标准的,鉴定费由甲方承担;服务不符合标准的,鉴定费由乙方承担。

2、因履行本合同引起的或者与本合同有关的争议,甲乙双方应首先通过友好协商解决,如果协商不能解决,应当向甲方所在地有管辖权的人民法院提起诉讼。

3、诉讼期间,本合同继续履行。

第十二条 合同生效及其它

1、合同经双方法定代表人或者授权代表签字并加盖单位公章后生效(委托代理人签字的需后附授权委托书,格式自拟,需经法定代表人签名及加盖单位公章)。

2、合同执行中涉及采购资金和采购内容修改或者补充的,须经财政部门审批,并签书面补充协议报财政部门备案,方可作为主合同不可分割的一部分。

3、本合同未尽事宜,遵照《中华人民共和国民法典》有关条文执行。

4、乙方在作业期间,负责培训所有工作人员合规操作各项设施、设备,并做好安全保障工作,做好相应各种紧急事件的预案制度。在作业期间,确保安全生产,对人身、财产安全做好指导、监督、管理工作,避免对相关人员、财产造成任何损害。如造成任何人身、财产损害的,由乙方承担一切法律责任。

第十三条 合同的变更、终止与转让

1、除《中华人民共和国政府采购法》第五十条规定的情形外,本合同一经签订,甲乙双方不得擅自变更、中止或者终止。

2、乙方不得擅自转让其应履行的合同义务。

第十四条 签订本合同依据

1、本合同协议书;

2、采购文件;

3、乙方提供的响应(或应答)文件;

4、成交通知书;

5、补充协议（如有）。

6、上述合同文件互相补充和解释。如涉及乙方义务的合同文件之间存在矛盾或者不一致之处，以最高要求的约定为准。

第十五条 本合同一式捌份，具有同等法律效力，采购代理机构贰份，甲方肆份，乙方贰份。

本合同自签订之日起2个工作日内，甲方应当将采购合同在广西壮族自治区财政厅指定的媒体上公告。

甲方（章）：广西中医药大学 2026年5月26日	乙方（章）：源资信息科技（上海）有限公司 2026年5月26日
单位地址：南宁市青秀区五合大道13号	单位地址：上海市长宁区天山路641号20幢611室
法定代表人或委托代理人：李雪斌	法定代表人或委托代理人：王成龙
电话：	电话：021-32504385
电子邮箱：	电子邮箱：wcl@tri-ibiotech.com
开户银行：	开户银行：中国工商银行股份有限公司上海虹桥开发区支行
账号：	账号：1001242709300376015
纳税人识别号或统一社会信用代码：	纳税人识别号或统一社会信用代码：913100006745993716
邮政编码：	邮政编码：200336

附件一：竞标声明

7. 竞标声明

致：（广西中医药大学）：

（源资信息科技（上海）有限公司）系中华人民共和国合法供应商，经营地址。

我方愿意参加贵方组织的（中医药人工智能研究中心软件授权服务采购项目）项目的竞标，为便于贵方公正、择优地确定成交供应商及其竞标产品和服务，我方就本次竞标有关事项郑重声明如下：

1. 我方向贵方提交的所有响应文件、资料都是准确的和真实的。

2. 我方不是为本次采购项目提供整体设计、规范编制或者项目管理、监理、检测等服务的供应商。

3. 在此，我方宣布同意如下：

- （1）将按磋商文件的约定履行合同责任和义务；
- （2）已详细审查全部磋商文件，包括澄清或者更正公告（如有）；
- （3）同意提供按照贵方可能要求的与磋商有关的一切数据或者资料；
- （4）响应磋商文件规定的竞标有效期。

4. 我方承诺符合《中华人民共和国政府采购法》第二十二条规定：

- （1）具有独立承担民事责任的能力；
- （2）具有良好的商业信誉和健全的财务会计制度；
- （3）具有履行合同所必需的设备和专业技术能力；
- （4）有依法缴纳税收和社会保障资金的良好记录；
- （5）参加政府采购活动前三年内，在经营活动中没有重大违法记录；
- （6）法律、行政法规规定的其他条件。

5. 我方在此声明，我方在参加本项目的政府采购活动前三年内，在经营活动中没有重大违法记录（重大违法记录是指供应商因违法经营受到刑事处罚或者责令停产停业、吊销许可证或者执照、较大数额罚款等行政处罚），未被列入失信被执行人、重大税收违法失信主体、政府采购严重违法失信行为记录名单，完全符合《中华人民共和国政府采购法》第二十二条规定的供应商资格条件，我方对此声明负全部法律责任。

6. 根据《中华人民共和国政府采购法实施条例》第五十一条要求对政府采购合同进行公告，但政府采购合同中涉及国家秘密、商业秘密的内容除外。我方就对本次响应

文件进行注明如下：（两项内容中必须选择一项）

☒我方本次响应文件内容中未涉及商业秘密；

☐我方本次响应文件涉及商业秘密的内容有：；

7. 与本磋商有关的一切正式往来信函请寄：上海长宁区天山路 18 号 701 室
邮政编号：200336

电话/传真：021-32504385/021-32504351 电子邮箱：wcl@tri-ibiotech.com

开户银行：工商上海虹桥开发区支行 帐号：1001242709300376015

8. 以上事项如有虚假或者隐瞒，我方愿意承担一切后果，并不再寻求任何旨在减轻或者免除法律责任的辩解。

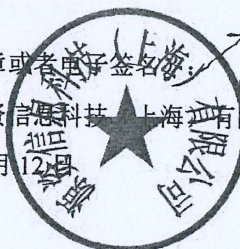
特此承诺。

注：如为联合体竞标，盖章处须加盖联合体牵头人电子签章并由联合体牵头人法定代表人分别签字或者盖章或者电子签名，否则响应文件按无效处理。

法定代表人（签字或者盖章或者电子签名）：

供应商（电子签章）：源资信息科技有限公司 上海有限公司

2026 年 5 月 12 日



附件二：成交通知书

成交通知书

源资信息科技（上海）有限公司：

经评定，编号为GXZC2026-C3-000713-GXCJ采购文件中的中医药人工智能研究中心软件授权服务采购项目，确定你公司成交，成交价格为1312000.00元。

自此通知书发出之日起25日内，与采购人签订政府采购合同。合同签订前，需按本项目采购文件和你公司响应文件等约定拟定合同文本（合同格式见采购文件），报我机构项目联系人确认。

采购人联系人：秦燕

电话：0771-4733924

代理机构联系人：张翁毓、梁健敏、尤昊

电话：13978883093/0771-5801477



附件三：售后服务承诺

5. 服务方案

1. 免费维护期

为确保用户能够顺利、高效地将 Schrödinger、Gaussian、MedeA、FLARE 软件应用于科研与工程实践，我们提供以下免费维护服务：

- 维护期限：自软件验收合格之日起。

序号	软件名称	免费维护时长	免费升级时长
1	Schrödinger 软件	10 年	10 年
2	Gaussian 软件	1 年	1 年
3	MedeA 软件	永久	1 年
4	FLARE 软件	5 年	5 年

- 维护范围：用户可通过指定的维护电话、电子邮件等渠道，获得我方技术团队提供的无限次、免费的技术支持。

2. 应急维护时间安排

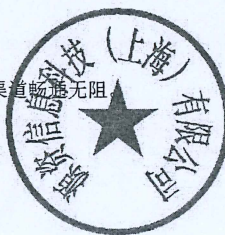
为应对用户在使用过程中遇到的紧急故障，我们设立了高效的应急响应机制：

- 紧急问题定义：指导致软件无法启动、核心计算模块崩溃、计算结果明显异常、或影响用户关键科研进度的问题。
- 响应时间：
 - ❖ 7x24 小时接收：我们提供 7x24 小时紧急问题接收渠道。
 - ❖ 30 分钟响应：在接到用户紧急问题报告后，技术支持工程师将在 30 分钟内通过电话或远程连接方式予以响应，开始问题诊断。
- 解决流程：
 - ❖ 级别 1 - 远程解决：约 80% 的常见紧急问题，我们力争在 4 个小时内通过远程协助方式解决。
 - ❖ 级别 2 - 原厂支持：对于复杂的疑难问题，我们将立即启动与美国原厂的技术支持通道，在 2 个工作日内提供解决方案或临时规避措施。
 - ❖ 现场支持：若问题无法通过远程方式解决，我们将派遣资深工程师在 2 小时内抵达用户现场进行处理。

3. 维护联系电话及技术服务人员

我们建立了专业的技术支持团队，确保沟通渠道畅通无阻。

- 技术支持热线：021-32504385
- 技术支持邮箱：support@tri-ibitech.com
- 技术负责人：李玮琨，手机：13564310557



4. 售后配合、伴随服务方案

我们的服务不止于销售，更注重长期的合作与伴随成长。

- 系统环境配合：协助用户完成软件在 Linux/Windows 集群环境的安装、调试与优化，确保与现有作业调度系统（如 PBS, SLURM）的无缝集成。
- 定期技术回访：每季度至少进行一次主动技术回访，了解软件使用情况，收集用户反馈，并提供优化建议。
- 新功能与应用培训：随着软件的版本更新，我们将定期组织线上或线下研讨会，介绍新功能及其在特定领域的应用案例。
- 科研合作支持：对于用户在特定研究方向上的高级需求，我们可以提供技术咨询，并协助用户与原厂的科学家建立联系，探讨更深层次的科研合作可能性。

5. 维护服务及售后配合服务收费标准

- 质保期内：提供免费远程和现场支持。
- 质保期后：持续提供免费远程技术支持，现场支持仅收取实际产生的差旅费。

6. 服务商的技术支持

- 本地知识库：我们建立了包含常见问题解答（FAQ）、技术文档、典型计算案例的本地知识库，可供用户快速查询。
- 原厂直达通道：我们与软件开发商建立了紧密的合作关系，拥有直接的技术支持通道。对于我们无法立即解决的复杂技术问题，可第一时间提交至原厂专家团队，确保用户问题得到最权威的解答。
- 二次开发支持：针对有特殊需求的用户，我们可以提供基于原有软件平台的脚本编写、工作流定制等初级二次开发支持服务。

7. 售后服务承诺

我们郑重向用户做出以下承诺：

- 响应承诺：严格遵守本方案中规定的应急响应时间（30 分钟内响应）。
- 质量承诺：确保提供的所有技术解决方案准确、有效，并由资深工程师进行质量把关。
- 诚信承诺：实事求是，不夸大服务能力，对于无法解决的问题，明确告知并积极寻求原厂资源。
- 持续服务承诺：无论用户规模大小，一视同仁，提供持续、稳定、高质量的技术支持服务。
- 用户满意度承诺：定期进行用户满意度调查，以用户的成功作为我们服务的最终目标。

8. 培训计划

为使用户能够快速掌握并深度利用 Schrödinger、Gaussian、MolScribe、FLARE 软件，我们制定了一套系统的培训计划。

- 培训形式：线上或现场培训，围绕用户指定的内容进行针对性培训。
- 培训日程安排：



Schrodinger 软件

时间	培训模块	培训内容
第一天	上午 Maestro 2D Sketcher MacroModel Ligand Designer Protein Preparation Workflow LigPrep	专题一:Maestro 使用指南 1.创建与修改分子 2.绘制结构 3.生成与可视化配体构象 4.小分子比对 5.蛋白质比对 6. Ligand Designer 简介 专题二:分子结构准备与可视化 1.结构可视化与准备简介 2.可视化目标结构 3.为 Glide 对接准备蛋白质结构 4.为 Glide 对接准备配体 5.分析准备后的结构
	下午 Multiple Sequence Viewer Prime Homology Modeling Structure Reliability Report SiteMap. Receptor Grid Generation Ligand Docking	专题一:构建同源模型 1.构建模型与评估质量 2.同源模型的优化 3.使用 SiteMap 识别与评估结合位点 4.问题解答 专题二:Glide 基于结构的虚拟筛选 1.基于结构的虚拟筛选介绍 2.运行虚拟筛选的前提条件 3.生成带有氢键约束的受体网格 4.使用氢键约束对接同源配体 5.使用约束对接筛选化合物 6.分析结果
第二天	上午 System Builder Molecular Dynamics Trajectory Player Simulation Quality Analysis Interaction Analysis	专题一: 分子动力学模拟流程 1.创建项目并导入结构 2.体系结构预处理 3.构建模型体系 4.运行分子动力学模拟 5.模拟轨迹观看 6.分子动力学分析



Gaussian 软件

时间	课程内容	主要知识点
第一天	上午 简介 模型搭建 原子轨道理论	Gaussian 软件介绍 搭建分子模型 模型搭建技巧 薛定谔方程、变分法/微扰法、电子自旋、自洽场方法、BO 近似、Hartree-Fock 方程、Roothaan 方程、求解过程
	下午 单点能计算 几何优化 基组	GaussView 提交任务 计算结果查看 几何优化计算、电荷布居、静电势图、振动分析、虚频消除、零点能、热力学能、键解离能 STO 与 GTO Pople 型基组的使用 Dunning 基组 赝势基组 混合基组 基组的选择
第二天	上午 后 HF DFT 过渡态	HF 极限与相关能 组态相互作用 耦合簇方法 微扰方法 密度泛函理论 Kohn-Sham 方法 常用泛函 限制性优化 过渡态搜索
	下午 势能面扫描 光谱计算 相互作用	势能面扫描 红外/拉曼光谱 同位素取代 紫外可见光谱 激发态计算 荧光与磷光计算 核磁共振计算 分子间相关作用计算 溶剂化

MedeA 软件

时间	培训模块	培训内容
第一天	上午 MedeA Environment Nanostructures Builder COD/COD GUI Defected and Doping Structures Builder	MedeA 功能、工作环境与流程概览 创建低维纳米材料（纳米管、纳米片） 从数据库快速检索和获取晶体结构 掌握各类模型的快速构建方法，为计算做准备
	下午 MedeA VASP MedeA VASP GUI	VASP 简介、计算性质一览、理论基础。 电子结构计算及结果分析（态密度、能带结构、电荷密度） 复杂体系的几何和电子结构计算及结果分析（掺杂、表面、吸附）
第二天	上午 MedeA VASP MedeA VASP GUI	材料理化性质计算（磁性、强关联体系、光学性质） 从头算分子动力学计算（AIMD） 实时机器学习（on-the-fly）
	下午 MedeA LAMMPS MedeA LAMMPS GUI MedeA EAM MedeA Forcefields	分子动力学介绍 MedeA LAMMPS 介绍 力场选择与分配策略 LAMMPS 图形界面任务设置介绍 能量最小化、平衡、退火等计算流程



附件四：技术要求偏离表

7. 技术要求偏离表

采购项目编号：GXZC2026-C3-000713-GXCJ

采购项目名称：中医药人工智能研究中心软件授权服务采购项目

分标号：无

项号	标的名称	序号	磋商文件技术要求	竞标响应	偏离说明
1	药物设计软件授权服务	1	平台为集成化一体式软件套件，提供统一的图形用户界面（GUI）和命令行接口，支持 Windows、Linux 和 MacOS 操作系统。	平台提供统一的图形用户界面，提供项目管理、可视化、计算设置和分析。所有计算模块均提供命令行接口，支持在 Windows、Linux 和 MacOS 上运行。 见 6.1 Schrödinger 软件彩页，投标文件第 16 页。	无偏离
		2	软件具备模块化架构，各模块之间可实现无缝数据交换与 workflow 整合，避免第三方工具依赖。	Schrödinger 采用高度模块化设计（如 Glide, Prime 等）。所有模块在 Maestro 平台内无缝集成，数据自动传递，无需文件格式转换或依赖第三方工具即可完成复杂 workflow。 见 6.1 Schrödinger 软件彩页，投标文件第 16 页。	无偏离
		3	支持集成项目管理、结构分析、绘图工具和自动化工作流程。	Maestro 本身集成了项目管理、分子结构分析、图表绘制工具，提供了强大、可视化的自动化 workflow。 见 6.1 Schrödinger 软件彩页，投标文件第 16 页。	无偏离
		4	平台支持多种分子文件格式（如 SDF、MOL2、PDB 等）的导入/导出，并具备自动化数据预处理能力。	支持 PDB, SDF, MOL2, SMILES 等所有主流格式。Protein Preparation Wizard 和 LigPrep 模块提供全自动、标准化的蛋白和配体结构预处理与优化功能。 见 6.1 Schrödinger 软件彩页，投标文件第 16 页。	无偏离
		5	允许用户在授权数量内随时登录使用，退出后自动释放许可，提高许可利用率。	平台支持用户在授权数量内随时登录使用，计算完成或者退出计算时自动释放许可。 见 6.1 Schrödinger 软件彩页，投标文件第 28 页。	无偏离
		6	支持多用户并发访问，许可数量可动态分配，无需绑定特定终端或用户。	平台支持用户并发访问，运行多人同时使用软件，许可数量可根据实际使用情况进行动态分配，许可不需要绑定特定终端。	无偏离



			见 6.1 Schrödinger 软件彩页, 投标文件第 28 页。	
7	支持多名研究人员同时登录同一项目界面, 进行结构查看、参数设置、结果分析等操作, 实现实时协作。	平台支持多名用户同时登录打开同一项目进行结构查看、参数设置、结果分析等操作, 实现实时协作。 见 6.1 Schrödinger 软件彩页, 投标文件第 28 页。	无偏离	
8	须提供多种精度对接模式, 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, 软件提供多种对接模式。(供应商在响应文件中提供彩页或官网对应参数的截图)	Glide 提供多种精度模式: HTVS、SP 模式, 在虚拟筛选过程中, 根据时间和精度的需要, 提供多种对接模式。 见 6.1 Schrödinger 软件彩页, 投标文件第 16 页。	无偏离	
9	支持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。	在 Glide 筛 选 流 程 中 , 可 集 成 QikProp 计算的 ADME 性质或自定义的分子量、官能团等规则进行前置或后置过滤, 自动排除不合适的分子。 见 6.1 Schrödinger 软件彩页, 投标文件第 16 页。	无偏离	
10	集成构象搜索工具, 能高效生成生物活性构象, 覆盖扩展构象空间, 并支持分布式处理。	MacroModel 提供全面的构象搜索算法。ConfGen 是高速、高质量的专用构象生成器。两者均支持分布式计算。见 6.1 Schrödinger 软件彩页, 投标文件第 17 页和第 20 页。	无偏离	
11	包含化学过滤器、聚类、多样性分析功能。	虚拟筛选 workflow 支持化学过滤功能, 构象分析工具支持聚类和多样性分析。 见 6.1 Schrödinger 软件彩页, 投标文件第 16 页。	无偏离	
12	支持 pKa 预测和互变异构枚举, 能返回多个异构体和电离状态及三维结构。	Epik 能够精确预测 pKa, 并生成配体的多种互变异构体和电离状态及其 3D 结构。 见 6.1 Schrödinger 软件彩页, 投标文件第 19 页。	无偏离	
13	提供分子模型生成工具, 能从二维结构生成精确三维模型, 支持互变异构、立体化学和离子化状态枚举, 可处理体系包括有机化合物、糖、核酸、小肽、蛋白等。	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; Ligprep 能生成配体的多种互变异构体和电离状态及其 3D 结构。 见 6.1 Schrödinger 软件彩页, 投标文件第 20 页。	无偏离	
14	须集成 ADME 性质预测, 能计算 logP、logS 等性质。(供应商在响应文件中提供彩页或官网对应参数的截图)	QikProp 专门用于预测类药性和 ADME 性质, 如 logP、logS 等。 见 6.1 Schrödinger 软件彩页, 投标文件第 20 页。	无偏离	

		15	可从 2D 结构自动生成低能 3D 构象, 支持手性识别与立体化学保持。	LigPrep 工具支持从 2D 结构自动生成低能 3D 构象, 并且能够进行手性识别与立体化学保持。 见 6.1 Schrödinger 软件彩页, 投标文件第 20 页。	无偏离
		16	提供结合位点识别工具, 能快速定位和排序结合位点, 并可视化疏水、氢键和金属结合区域。	SiteMap 能快速探测并排序蛋白表面的潜在结合口袋, 并可视化其理化性质特征。 见 6.1 Schrödinger 软件彩页, 投标文件第 18 页。	无偏离
		17	无缝集成分子对接流程, 自动生成格点设置用于虚拟筛选。	SiteMap 识别的位点可直接用于 Glide, 自动生成对接网格文件, 用于虚拟筛选。 见 6.1 Schrödinger 软件彩页, 投标文件第 18 页。	无偏离
		18	提供蛋白-配体相互作用分析功能, 辅助先导化合物互补性优化。	Maestro 内置强大的蛋白-配体相互作用分析工具, 可自动生成 2D/3D 相互作用图, 指导先导化合物优化。 见 6.1 Schrödinger 软件彩页, 投标文件第 16 页。	无偏离
		19	授权期限≥10 年; License 模式: 不限安装, Token 模式: 软件升级及售后服务: 提供不少于 10 年的软件免费升级及免费技术支持。	支持在授权期内, 软件不限安装, 并使用 Token 模式, 给定数量的 Token 内可以进行多任务并发计算, 提供 10 年的软件免费升级及免费技术支持。	无偏离
		20	配套光盘(含说明书)一套。	支持配套光盘。	无偏离
2	量子化学软件授权服务	1	支持分子力学计算, 包括 Amber、Dreiding 和 UFF 力场。	支持分子力学计算, 包括 Amber、Dreiding 和 UFF 力场。 见 6.2 Gaussian 软件彩页, 投标文件第 30 页。	无偏离
		2	支持半经验方法, 包括 CND0/2、INDO、MIND03、MNDO、AM1、PM3、PM3MM、PM6、PDD、最新发布的 PM7, 支持 DFTB 和 DFTBA 方法。	支持半经验方法, 包括 CND0/2、INDO、MIND03、MNDO、AM1、PM3、PM3MM、PM6、PDD、最新发布的 PM7, 支持 DFTB 和 DFTBA 方法。 见 6.2 Gaussian 软件彩页, 投标文件第 30 页。	无偏离
		3	支持量子化学从头算方法, 包括 HF、MP2、MP3、MP4(DQ)、MP4(SDQ)、MP4、MP5、CID、CISD、QCISD、QCISD(T)、CCD、CCSD、CCSD(T)、BD、BD(T)、CASSCF 和 RASSCF 等方法。	支持 Hartree-Fock (HF); Møller-Plesset 微扰理论: MP2、MP3、MP4(SDQ)、MP4(SDTQ)、MP5; 耦合簇方法: CCD、CCSD、CCSD(T); Brueckner 对关联方法: BD、BD(T); 完全活性空间自洽场 (CASSCF); 支持限制活性空间 (RAS) 和锥形交叉优化等。 见 6.2 Gaussian 软件彩页, 投标文件第 30 页。	无偏离



			30 页。	
	4	支持 MP2 等级的完备基组外推计算 Complete Basis Set MP2 Extrapolation); EOMCC 耦合簇运动方程 (EOM-CC) 方法支持结构优化。	高精度能量模型: G1-G4 系列、CBS 系列、W1 系列, 均包含多种变体, 其中 CBS 为 MP2 等级的完备基组外推计算方法; 激发态方法: TD-DFT、EOM-CCSD 和 SAC-CI 见 6.2 Gaussian 软件彩页, 投标文件第 30 页。	无偏 离
	5	支持纯密度泛函方法计算中使用基组的密度拟合技术。	用于纯 DFT 计算的密度拟合和 Coulomb 引擎, 包括自动生成拟合基组。 见 6.2 Gaussian 软件彩页, 投标文件第 48 页。	无偏 离
	6	支持纯密度泛函方法计算中使用通用长程校正方案 (LC)。	密度泛函 (DFT) 方法: 支持大量已发表的 泛函; 在已定义的情况下, 可进行长程修正 和经验色散修正。 见 6.2 Gaussian 软件彩页, 投标文件第 30 页。	无偏 离
	7	支持杂化密度泛函方法, 包括最近发布的 M08 family, MN15, MN15L 等泛函; 支持双杂化密度泛函方法, 包括最新发布的 DSDPBEP86, PBE0DH 及 PBEQIDH; 使用 GTO 类全电子基组进行运算, 用户可自定义基组; 默认情况下使用高效的 Harris 初始猜测。	杂化方法: B3LYP、B3P86、P3PW91、B1 及变体、B98、B97-1、B97-2、PBE1PBE、HSEh1PBE 及变体、O3LYP、TPSSH、tHCTHhyb、BMK、AFD、M05、M052X、M06、M06HF、M062X、M08HX、PW6B95、PW6B95D3、M11、SOGGA11X、N12、MN12SX、N12SX、MN15、HISStPBE、X3LYP、BHandHLYP; 双杂化方法: B2PLYP 和 mPW2PLYP 及其带色散校正的变体、DSDPBEP86、PBE0DH、PBEQIDH; GTO 类全电子基组进行运算, 用户可自定义基组; Harris 初始猜测。 见 6.2 Gaussian 软件彩页, 投标文件第 48-49 页。	无偏 离
	8	支持将分子内各个片段的初始猜测整合为对整个分子的初始猜测。	由片段猜测或片段 SCF 解生成的初始猜测。 见 6.2 Gaussian 软件彩页, 投标文件第 48 页。	无偏 离
	9	支持 ONIOM 分层计算方法, 能运行 ONIOM 频率计算和 IRC 分析; (供应商在响应文件中提供彩页或官网对应参数的截图)。	ONIOM 支持两层次或三层次的 QM:MM 和 QM:QM 模型; 提供高效且可靠的能量、优化和频率计算。整个体系的振动频率可以高效地计算出来, 且不会忽略任何 MM 耦合项。可以执行真正的内禀反应坐标 (IRC) 计算 (而	无偏 离



			不仅仅是“坐标驱动”)。 见 6.2 Gaussian 软件彩页, 投标文件第 36 页。	
	10	支持 HF、DFT 和 ONIOM(MM:MO) 等级下的 BOMD 和 ADMP 分子动力学计算。	BOMD 分子动力学 (所有解析梯度方法); ADMP 分子动力学: HF、DFT、ONIOM(MO:MM) 见 6.2 Gaussian 软件彩页, 投标文件第 50 页。	无偏离
	11	支持自洽反应场溶剂模型来模拟溶剂效应, 可以对 ONIOM 计算使用溶剂模型; 支持红外、拉曼、共振拉曼、核磁、振动圆二色等基态光谱的计算, VCD 及 ROA 光谱支持非谐振计算。	自洽反应场溶剂化模型: ONIOM 计算中的溶剂效应; 支持红外、拉曼、共振拉曼、核磁、振动圆二色等基态光谱的计算, VCD 及 ROA 光谱支持非谐振计算。 见 6.2 Gaussian 软件彩页, 投标文件第 30 页和第 52 页。	无偏离
	12	支持激发态的几何构型优化和频率分析, TD-DFT 激发态计算支持解析频率 (frequencies, IR 及 Raman)、过渡态优化 (TS) 及内禀反应坐标计算 (IRC), 包括考虑溶剂效应的情况; (供应商在响应文件中提供彩页或官网对应参数的截图)	Gaussian 可以计算激发态几何结构、紫外-可见光谱, 在激发态势能面上对过程和反应进行建模, 并预测电子振动吸收和发射光谱。计算可在气相和溶液中进行。在开发 Gaussian 16 的过程中, 激发态方法和性质得到了大量关注。借助其解析激发态频率, 您可以高效地优化激发态过渡结构、进行内禀反应坐标 (IRC) 计算以及预测电子振动光谱, 同时可以考虑溶剂化效应。 见 6.2 Gaussian 软件彩页, 投标文件第 43 页。	无偏离
	13	支持溶液中指定态的激发或者去激发计算, 支持 Adamo 激发态电荷转移分析; 支持电子振动光谱计算。	Gaussian 16 在激发态计算中集成了平衡 (Equilibrium) 和非平衡 (Non-equilibrium) 溶剂化模型, 分别适用于几何优化 (缓慢过程) 和垂直激发 (快速过程), 支持通过外部迭代程序实现激发态反应场的部分弛豫, 适用于荧光和磷光等发光过程的模拟, SCRF 关键词可以指定态的激发/去激发溶剂校正计算; Adamo 激发态电荷转移分析即 Ciofini 的激发态电荷转移诊断指标; 预测电子振动光谱。 见 6.2 Gaussian 软件彩页, 投标文件第 34 页、第 43 页和第 52 页。	无偏离
	14	支持一维、二维和三维的周期边界条件计算, 支持周期边界条件下的梯度计算; 支持量子化学组合方法如 G0、G2、G3、G4 及变体 CBS 系列和 W1 系列方法。	一维、二维、三维周期边界条件能量与梯度 (HF 和 DFT); 支持量子化学组合方法如 G0、G2、G3、G4 及变体 CBS 系列 CBS-q、CBS-QB3、	无偏离

				ROCBS-QB3、CBS-Q、CBS-APNO, WIU、W1BD、W1RO (增强的芯相关能计算) 见 6.2 Gaussian 软件彩页, 投标文件第 48 页和第 50 页。	
		15	Linux, Windows 操作系统版本各一套。	Linux, Windows 操作系统版本各一套。	无偏离
		16	另配套该量子化学软件图形界面 WINDOWS 版一套。	另配套该量子化学软件图形界面 WINDOWS 版一套。	无偏离
		17	授权期限: 永久授权; License 模式: LINUX/WINDOWS 各一套, 不限连接数和并发数; 软件升级及售后服务: 提供不少于 1 年的软件免费升级及免费技术支持。	授权期限: 永久授权; License 模式: LINUX/WINDOWS 各一套, 不限连接数和并发数; 软件升级及售后服务: 提供 1 年的软件免费升级及免费技术支持。	无偏离
		18	配套光盘 (含说明书) 一套。	配套光盘 (含说明书) 一套。	无偏离
3	第一性原理仿真计算模拟软件授权服务	1	能够提供建模用户图形界面创建常见的计算模型、计算及管理任务工具、数据库管理工具。	MedeA 软件是领先的原子尺度下全功能材料设计与性质预测平台。MedeA 将世界领先的计算引擎与性质预测模块、实验数据库、多种建模和分析工具集成在 MedeA Environment 中, 为用户提供了非常友好的环境, 适用于各种应用场景。 MedeA Environment 主要组成部分: 1) 数据库及管理工具: InfoMaticA 2) 基础建模工具: 晶体、表面、超胞、分子、吸附、缺陷、掺杂、聚合物、纳米结构、层状结构等 3) 计算作业管理工具: TaskServer 专用于调用各种计算引擎进行计算, JobServer 专用于计算作业的管理。 4) 可视化结果分析工具: 几何性质、对称性、体积、密度、动画轨迹等 见 6.3 MedeA 软件彩页, 投标文件第 54 页。	无偏离
		2	能够提供纳米建模工具建立纳米团簇、纳米管、纳米线、纳米包裹等。	MedeA 中的 Nanostructures Builder 模块能够创建各种形状的纳米结构。只需设置元素类型、手性、方向、包裹、嵌套等参数, 就可以创建纳米管、纳米团簇、纳米包裹、纳米环等结构。 见 6.3 MedeA 软件彩页, 投标文件第 64 页。	无偏离
		3	能够创建聚合物结构模型, 支持多种	MedeA 中的 Polymer Builder 模块能够	无偏

		聚合方式，提供上百种聚合物重复单元。	处理各种立构、定义单体单元数，指定共聚形式（交替共聚、随机取向及嵌段共聚等）创建聚合物链。MedeA 自带的聚合物重复单元库包含接近 150 种聚合物重复单元结构，支持采用 Polymer Builder 模块直接调用或自定义创建重复单元结构。 见 6.3 MedeA 软件彩页，投标文件第 67 页。	离
	4	具备自动搜索掺杂或缺陷位和随机取代掺杂/缺陷模型创建的功能，无需额外编写代码。	MedeA 中具有专门的缺陷掺杂建模模块 Defected and Doping Structures Builder，包含三种工具： 1) 间隙掺杂位置搜索：Find Empty Space，自动分析结构中存在的间隙空间，并支持直接在晶胞内高对称点处直接插入掺杂原子。 2) 取代掺杂/缺陷位置搜索：Substitutional Builder，根据设置的取代/缺陷位置个数和结构对称性自动搜索并创建取代掺杂/缺陷结构。 3) 随机取代掺杂/缺陷建模：Random Substitutions，根据设置的取代元素种类、取代/缺陷个数或浓度创建一个或多个随其取代/缺陷模型，支持一次性多次取代。 见 6.3 MedeA 软件彩页，投标文件第 60 页、第 61 页、第 62 页。	无偏离
	5	具备内嵌于软件的晶体数据库，不少于 40 万条数据，包含无机、有机、金属等晶体数据，每条数据包含 3D 结构、空间群、原子位置、来源出处等相关信息。（供应商在响应文件中提供彩页或官网对应参数的截图）	MedeA 中包含数据库 COD (Crystallography Open Database) 及其用户图形界面 COD-GUI，COD 数据库创于 2003 年 3 月，是有机、无机、金属、有机化合物和矿物成分等数据增长最快的数据库。截至 2022 年，结构数据量已超过 450,000。每条数据包含以下信息：3-D 结构模型、晶格参数、对称性（空间群）、Wyckhoff 位置、占位、原子坐标、原子间距及键角、文献出处及实验条件等。 见 6.3 MedeA 软件彩页，投标文件第 60 页。	无偏离
	6	能够提供晶体数据库用户图形界面。可多组合条件搜索，包含不同条件的判断语句。搜索结果可按照对称性	MedeA Environment 中包含数据库管理工具 Inf6MaticA，用户不仅能够在已有晶体数据库中快速检索结构数据，同	无偏离

		名称等不同属性进行排序显示。能够在已搜索到的结构中寻找晶格参数最接近整体平均值的数据,给出最优初始结构。	时支持在自己创建的结构数据库进行搜索。通过 InfoMaticA,能够进行多组合条件(分子式、元素种类、Database ID 等)搜索,且支持采用多种判断语句。搜索的结果数据以表格列出,可根据名称、对称性等进行升序降序排列。另外,包含 Find median structures 工具,支持对所有结构进行分析归类,并列出每一类结构中晶格参数最接近平均值的结构,给出最优初始结构。支持选择多个数据添加到结构列表,用于之后的高通量计算。 见 6.3 MedeA 软件彩页,投标文件第 55 页。	
	7	能够对材料体系的几何和电子结构进行第一性原理计算。可计算几何性质,电子性质,光学性质,表面性质,磁学性质、力学性质,电声耦合。	MedeA 中的 VASP 模块针对材料体系的几何和电子结构进行第一性原理计算,如几何性质(平衡晶格参数、原子位置等)、电子性质(电荷密度、态密度、能带结构等)、光学性质(介电函数、光吸收等)、表面性质(吸附能、表面能等)、磁学性质(磁矩、磁化密度等)、力学性质(弹性常数矩阵等)、电声耦合方法。 见 6.3 MedeA 软件彩页,投标文件第 71 页和第 72 页。	无偏离
	8	支持从头分子动力学模拟,实时生成机器学习力场,并采用生成的机器学习力场实现从头分子动力学计算的加速和大体系结构能量的快速计算。(供应商在响应文件中提供彩页或官网对应参数的截图)	MedeA 中的 VASP6 模块支持第一性原理分子动力学,即从头分子动力学模拟,支持 nVE、nVT、npT 系综、能够模拟退火、平均值、不确定性、运动轨迹。同时,VASP 模块还支持在从头分子动力学计算的同时实时(on the fly)训练力场,即机器学习(MLFF)功能,生成的力场可用于后续从头分子动力学计算的速度提升及对应大体系的结构、能量、力学性质等的快速计算。 见 6.3 MedeA 软件彩页,投标文件第 72 页。	无偏离
	9	能够采用 PAW 赝势进行第一性原理计算。PAW 赝势要覆盖元素周期表所有元素,并根据不同精度提供元素的不同赝势版本,自动检测电荷,并支持更灵活的电荷修正。支持多种处理方法和泛函,包括 LDA、GGA、杂化泛函、范德华密度泛函、Meta-GGA	MedeA 中的 VASP 模块基于平面波赝势方法计算周期性体系的电子结构。赝势种类为 PAW 赝势,覆盖元素周期表所有元素,每种元素包含根据半芯态和计算精度区分的多种赝势版本,能够自动检测电荷并支持其灵活修正,还包括一组适用于高精度激发态 GW 方法计	无偏离

		DFT+U、范德华力场修正等。	算的赝势。 VASP 模块还支持多种泛函： 局域密度近似（LDA） 广义梯度近似（GGA）泛函：AM05、PBEsol、PBE、rPBE、BLYP 等。 杂化泛函：HSE06、PBE0、B3LYP 等。 范德华密度泛函：BEEF-vdW 和 SCAN+rVV10 等 Meta-GGA 泛函：revTPSS、TPSS、SCAN、MS2、MS1、MS0、M06-L、modified BeckeJohnson LDA。 另外，VASP 模块还支持范德华力场修正（如 DFT-D2/D3、DFT-dDsC 和 Tkatchenko Scheffler 等）、DFT+U 等处理方法。 此外，VASP 模块还支持范德华力场修正（如 DFT-D2/D3、DFT-dDsC 和 Tkatchenko Scheffler 等）、DFT+U 等处理方法。 见 6.3 MedeA 软件彩页，投标文件第 72 页和第 73 页。	
	10	具有第一性原理计算模块的用户图形界面，支持在 Windows 界面下设置所有计算参数，具有实时机器学习设置的独立面板，可以自动生成输入文件。支持导出以上输入文件使用命令行提交作业，也支持直接通过界面一键提交作业。	MedeA 中的 VASP GUI 模块为第一性原理计算模块 VASP 的用户图形界面，支持在 Windows 或 Linux 界面下设置 VASP 所有计算参数，面板包含基本设置、SCF 设置、赝势泛函设置、性质参数设置、实时机器学习参数设置、高级参数等。参数设置结束后支持一键提交作业，同时支持生成并导出输入文件，自主上传至集群采用命令行提交 VASP 作业。 见 6.3 MedeA 软件彩页，投标文件第 71 页。	无偏离
	11	能够进行分子动力学相关模拟计算，体系支持气态、液态和固态及混合体系，能够模拟具有上百万原子数的体系。	MedeA 中的 LAMMPS 模块是现今世界上领先的基于力场的分子动力学程序之一，适用于气态、液态、固态及混合体系，能够实现基于力场的分子动力学大规模并行计算，支持 CPU 和 GPU，最多可处理上百万原子的体系。LAMMPS 模块能够进行 NVE、NVT 和 NPT 系综下的分子动力学模拟，计算能量、应力张量等，输出温度、密度、压强、晶格参数等 见 6.3 MedeA 软件彩页，投标文件第	无偏离

			74 页和第 75 页。	
	12	具有分子动力学计算模块的用户图形界面, 支持在 Windows 界面下设置所有计算参数、流程图形式提交作业进行计算, 并实现可视化结果分析, 如相互作用、RDF、动力学轨迹等。	MedeA 中的 LAMMPS GUI 模块为分子动力学计算模块 LAMMPS 的用户图形界面, 支持在 Windows 或 Linux 界面下设置 LAMMPS 的所有计算参数, 采用流程图方式组合能量最小化和不同系综的弛豫步骤, 一键提交作业进行计算。可视化结果分析包括: 分子动力学轨迹、Distance、RDF、Distributions、Pair Correlations、Group Interactions 分析。 见 6.3 MedeA 软件彩页, 投标文件第 74 页和第 75 页。	无偏离
	13	具有上百种适用于有机分子、半导体、无机化合物等多种体系的力场。	MedeA 中的 Forcefields 模块包含上百种力场库, 这些力场文件可导出, 可查看, 可编辑, 可自行修改。力场适用体系包含有机、无机、半导体、稀有金属和反应力场。力场种类包含 PCFF+、Buckingham、Tersoff、COMB3 等。 见 6.3 MedeA 软件彩页, 投标文件第 77 页和第 78 页。	无偏离
	14	具有嵌入原子作用势 (EAM), 即适用于金属合金体系的力场。	MedeA 中的 EAM 模块基于嵌入式原子方法 (Embedded Atom Method, EAM), 提供了对金属体系结构、力学和热力学性质的高效计算描述。MedeA LAMMPS 模块能够直接调用 EAM 方法对金属合金体系进行模拟。 见 6.3 MedeA 软件彩页, 投标文件第 81 页和第 82 页。	无偏离
	15	具有适用于研究反应的力场 ReaxFF。力场文件支持导出、查看、修改、编辑、分享, 同时支持外部力场的引入。	MedeA 中的 ReaxFF 模块支持在原子尺度上对固体、液体和气体中的化学反应进行计算研究, 其空间范围约为几纳米, 时间范围可达几纳秒。ReaxFF 力场文件可导出、查看、编辑、分享, 编辑后的力场需满足 MedeA 中的力场格式, 即可在 MedeA LAMMPS 中使用。支持外部力场导入, 任何已发布或自定义生成的参数集都可以轻松导入, 不断扩展应用范围。 见 6.3 MedeA 软件彩页, 投标文件第 83 页。	无偏离
	16	授权期限: 永久授权; License 模式; 服务器端不限安装, 不限连接数和并发数, 绑定 6 个客户端; 软件升级及售	授权期限: 永久授权; License 模式; 服务器端不限安装, 不限连接数和并发数, 绑定 6 个客户端; 软件升级及售	无偏离

			售后服务：提供不少于 1 年的软件免费升级，永久免费技术支持。	后服务：提供不少于 1 年的软件免费升级，永久免费技术支持。	
		17	配套光盘（含说明书）一套。	配套光盘（含说明书）一套。	无偏离
4	FEP 软件授权服务	1	配体场分析：支持静电、vDW、疏水场分析。	Flare V11（型号 Flare Pro+）提供专有的 XED 力场，可进行配体场分析，包含配体的静电、vDW 与疏水场分析。 见 6.4 Flare 软件彩页，投标文件第 85 页。	无偏离
		2	蛋白相互作用场分析：支持静电、vDW、疏水场分析。	Flare V11（型号 Flare Pro+）提供专有的 XED 力场，可进行的蛋白相互作用场分析，包含静电、vDW 与疏水场分析。 见 6.4 Flare 软件彩页，投标文件第 86 页。	无偏离
		3	蛋白配体静电互补性分析：不仅可以用 XED 力场进行定性计算，还可以定量分析。	Flare V11（型号 Flare Pro+）包括静电互补性分析模块，使用 XED 力场对蛋白与配体的表面进行进行或定量的互补性打分、着色分析。 见 6.4 Flare 软件彩页，投标文件第 86 页。	无偏离
		4	分子动力学模拟：小分子支持 OpenFF 系列力场以及自定义力场、GCNMC 水增强采样。	Flare V11（型号 Flare Pro+）的 Dynamics 模块提供多种小分子力场，包括 OpenFF 系列力场，以及自定义力场，提供 GCNMC 水增强采样技术提高计算精度。 见 6.4 Flare 软件彩页，投标文件第 87 页。	无偏离
		5	水合位点与热力学性质计算：支持基于格点与分子动力学模拟的水合位点与热力学性质计算，其中几个格点的方法需要支持 XED 力场。	Flare V11（型号 Flare Pro+）的水分析模块包含 3D-RISM（基于格点的方法）与 GIST（基于分子动力学模拟的方法）两种方法，可以用来计算蛋白表面或口袋的水合位点计算，以及水合位点的热力学分析。其中 3D-RISM 可以使用 AMBER 力场与 XED 力场两种方法进行计算。 见 6.4 Flare 软件彩页，投标文件第 88 页和第 89 页。	无偏离
		6	炼金术 FEP 相对结合自由能计算：小分子支持 OpenFF 系列力场以及基于 QM 的自定义力场、GCNMC 水增强采样。	Flare FEP 是一种炼金术 FEP 相对自由能计算方法，小分子支持 GAFF2 系列力场与 OpenFF 系列力场，支持使用 QM 方法自定义力场，包含了 GCNMC 水增强采样技术。 见 6.4 Flare 软件彩页，投标文件第 90 页。	无偏离

			页。	
7	FEP 计算支持本地与云（或局域网 HPC）最高共 200 张 GPU 卡的并行计算；（供应商在响应文件中提供彩页或官网对应参数的截图）	Flare FEP 计算需要大量的 GPU 计算支援，本次供货承诺提供的 Flare PEP 授权支持本地与云共最多 200 张 GPU 卡的并行计算。 见 6.4 Flare 软件彩页，投标文件第 87 页和第 90 页。	无偏 离	
8	授权期限≥5 年；License 模式：绑定 1 台服务器，不限连接数和并发数；软件升级及售后服务：提供不少于 5 年的软件免费升级及免费技术支持。	提供 Flare V11（型号 Flare Pro+）与 Flare FEP 软件的仅限学术用途、授权期限位 5 年（自授权生效之日起计算）。License 模式：绑定 1 台服务器，不限单机登陆连接数和并发数；软件升级及售后服务：授权有效期内软件免费升级及免费技术支持。	无偏 离	
9	配套光盘（含说明书）一套。	软件可通过光盘或移动盘等介质交付，升级时通过下载链接获取，软件包自带说明书。 见 6.4 Flare 软件技术参数证明截图，投标文件第 91 页。	无偏 离	

注：

1. 说明：应对照磋商文件“第三章采购需求”中的技术要求逐条作出明确响应，并作出偏离说明。
2. 供应商应根据自身的承诺，对照磋商文件要求，在“偏离说明”中注明“正偏离”、“负偏离”或者“无偏离”。既不属于“正偏离”也不属于“负偏离”即为“无偏离”。

法定代表人或者委托代理人（签字或者电子签名）：
 供应商（电子签章）：通策信息科技（上海）有限公司

2026 年 12 月

澄清函

针对我方所投中医药人工智能研究中心软件授权服务采购项目（项目编号：GXZC2026-C3-000713-GXCJ），现就投标商务技术文件内《技术要求偏离表》中，关于药物设计软件授权服务第十九条相关响应内容，正式作出如下澄清说明：

我方此前针对该条款作出的响应内容为：支持授权期内软件不限安装部署，采用 Token 授权模式，可在核定 Token 数量范围内实现多任务并发计算，同步提供十年软件免费升级与全程免费技术支持。

现进一步明确：我方本次投标响应完整包含三项核心内容，分别为软件授权使用期限 10 年、license 模式采用不限安装 + Token 管控模式、配套服务承诺为 10 年免费软件升级及免费专属技术支持，所有响应内容真实有效，完全契合项目采购相关需求。



附件五：商务要求偏离表

4. 商务要求偏离表格式

采购项目编号：GXZC2026-C3-000713-GXCJ

采购项目名称：中医药人工智能研究中心软件授权服务采购项目

分标号：无

项目	磋商文件商务要求	供应商的响应	偏离说明
合同签订时间	自成交通知书发出之日起 25 个日历天内	自成交通知书发出之日起 25 个日历天内	无偏离
服务时间及服务地点	1.服务时间：各软件授权有效期内。 2.服务地点：广西中医药大学仙葫校区。	1.服务时间：各软件授权有效期内。 2.服务地点：广西中医药大学仙葫校区。	无偏离
验收标准、规范	1、符合国家及行业有关技术规范和技术标准。 2、依据采购文件采购需求、响应文件、合同约定进行验收，成交人的响应文件及 承诺与合同约定标准进行验收；甲乙双方如对质量要求和技术指标的约定标准有 相互抵触或异议的事项，由采购人在采购文件与响应文件中按质量要求和技术指标比较优胜的原则确定该项目的约定标准进行验收。	1、符合国家及行业有关技术规范和技术标准。 2、依据采购文件采购需求、响应文件、合同约定进行验收，成交人的响应文件及 承诺与合同约定标准进行验收；甲乙双方如对质量要求和技术指标的约定标准有相互抵触或异议的事项，由采购人在采购文件与响应文件中按质量要求和技术指标比较优胜的原则确定该项目的约定标准进行验收。	无偏离
售后服务要求	1、质保期：按国家有关产品“三包”规定执行“三包”，交付验收合格上线并通过终验之日起，各软件免费技术支持服务期限内享有免费质保服务。采购人每月对软件平台进行一次监督检查，乙方应承担所有检查相关费用。 2.安装和培训：软件到货后 5 个工作日内完成安装调试服，20 个工作日内完成线上或现场培训服务。	1、质保期：按国家有关产品“三包”规定执行“三包”，交付验收合格上线并通过终验之日起，各软件免费技术支持服务期限内享有免费质保服务。采购人每月对软件平台进行一次监督检查，乙方应承担所有检查相关费用。 2.安装和培训：软件到货后 5 个工作日内完成安装调试服，20 个工作日内完成线上或现场培训服	无偏离

	3、响应时间：成交供应商接到故障通知后在 2 小时内到达采购人指定现场；一般问题应在 8 小时内解决，重大问题或其他无法迅速解决的问题应在 48 小时内解决。提供 7×24 小时的电话、QQ 远程协助、现场支持或其他校方指定的方式的服务。 4、售后服务技术人员要求：专职人员。 5、质保期内对系统进行免费的原厂维护、系统运行维护服务、数据维护服务、在线技术支持、主动式服务、快速响应等服务。	务。 3、响应时间：成交供应商接到故障通知后在 2 小时内到达采购人指定现场；一般问题应在 8 小时内解决，重大问题或其他无法迅速解决的问题应在 48 小时内解决。提供 7×24 小时的电话、QQ 远程协助、现场支持或其他校方指定的方式的服务。 4、售后服务技术人员要求：专职人员。 5、质保期内对系统进行免费的原厂维护、系统运行维护服务、数据维护服务、在线技术支持、主动式服务、快速响应等服务。	
付款方式	1.付款方式：本合同签订生效之日起 15 个工作日内，采购人向成交供应商（乙方）支付合同总金额的 30%；待项目完成并经采购人验收合格后 15 个工作日内，采购人向成交供应商（乙方）结清剩余 70% 合同款项。 2.票据要求：每次付款前成交供应商必须按照合同要求提供真实、有效、合法的正式发票，并经采购人检查票据合格。一旦发现成交供应商提供虚假发票，除须向采购人补开合法发票外，还须向采购人支付发票票面金额一倍的违约金，且采购人有权终止合同，因终止合同而产生的一切损失均由供应商承担。如乙方未提供符合要求的发票前，甲方有权暂停付款且不视为违约。 3.本合同使用货币币制如未作特别说明均为人民币。	1.付款方式：本合同签订生效之日起 15 个工作日内，采购人向成交供应商（乙方）支付合同总金额的 30%；待项目完成并经采购人验收合格后 15 个工作日内，采购人向成交供应商（乙方）结清剩余 70%合同款项。 2.票据要求：每次付款前成交供应商必须按照合同要求提供真实、有效、合法的正式发票，并经采购人检查票据合格。一旦发现成交供应商提供虚假发票，除须向采购人补开合法发票外，还须向采购人支付发票票面金额一倍的违约金，且采购人有权终止合同，因终止合同而产生的一切损失均由供应商承担。如乙方未提供符合要求的发票前，甲方有权暂停付款且不视为违约。 3.本合同使用货币币制如未作特别说明均为人民币。	无偏离



报价要求	供应商须就本项目需求清单中的所有实施内容作完整报价，包括： 1.本次报价包括人工、运输、装卸、安装、调试、技术支持、售后服务、更新升级、税金和相关的服务所需要的一切费用。 2.对于本文件中明确列明须报价的服务，供应商存在漏报的，将导致响应被否决。对于本文件中未列明，而供应商认为必需的费用也需列入总报价。在合同实施时，采购人将不予支付成交供应商没有列入的项目费用，并认为此项目的费用已包括在响应总报价中。	我方就本项目需求清单中的所有实施内容作完整报价，包括： 1.本次报价包括人工、运输、装卸、安装、调试、技术支持、售后服务、更新升级、税金和相关的服务所需要的一切费用。 2.对于本文件中明确列明须报价的服务，供应商存在漏报的，将导致响应被否决。对于本文件中未列明，而供应商认为必需的费用也需列入总报价。在合同实施时，采购人将不予支付成交供应商没有列入的项目费用，并认为此项目的费用已包括在响应总报价中。	无偏离
------	---	---	-----

注：

1. 说明：应对照磋商文件“第三章采购需求”中的商务要求逐条作出明确响应，并作出偏离说明。
2. 供应商应根据自身的承诺，对照磋商文件要求在“偏离说明”中注明“正偏离”、“负偏离”或者“无偏离”。既不属于“正偏离”也不属于“负偏离”即为“无偏离”。

法定代表人或者委托代理人（签字或者电子签名）：王飞龙
 供应商（电子签章）：派资信息科技（上海）有限公司

2026年04月12日

附件六：最终报价表

磋商最终报价表

项目名称： 中医药人工智能研究中心软件授权服务采购项目
项目编号： GXZC2026-C3-000713-GXCJ
分标（如有）： 无
供应商名称： 源资信息科技（上海）有限公司

单位：元

序号	标的名称	品牌	数量及单位	单价	总价	备注
1	药物设计软件授权服务	Schrödinger	1 套	596,000.00	596,000.00	授权 10 年
2	量子化学软件授权服务	Gaussian	1 套	106,000.00	106, 000.00	永久授权
3	第一性原理仿真计算模拟软件授权服务	MedeA	1 套	215,000.00	215,000.00	永久授权
4	FEP 软件授权服务	FLARE	1 套	395, 000.00	395, 000.00	授权 5 年
合计金额大写：人民币 <u>壹佰叁拾壹万贰仟元整</u> （¥ <u>1,312,000.00</u> ）						
合同履行期限：各软件授权有效期内。						

注：

1. 供应商的报价表必须加盖供应商电子签章并由法定代表人或者委托代理人签字或者电子签名，否则其响应文件按无效处理。
2. 报价一经涂改，应在涂改处加盖供应商公章或者加盖电子签章或者由法定代表人或者授权委托人签字（或者电子签名），否则其响应文件按无效处理。
3. 如为联合体竞标，“供应商名称”处必须列明联合体各方名称，标注联合体牵头人名称，否则其响应文件按无效响应处理。
4. 如为联合体竞标，盖章处须加盖联合体牵头人电子签章，否则其响应文件按无效处理。
5. 如有多分标，分别列明各分标的报价表，否则其响应文件按无效响应处理。



法定代表人或者委托代理人（签字或者电子签名）：

陈龙

供应商（电子签章）：上海资信信息科技有限公司

日期：2020年5月12日

有限公司
章

附件七：履约保证金缴纳凭证

中国工商银行 网上银行电子回单（补打）

电子回单号码：0913-8609-2625-1100

打印日期：2026年5月19日

第1次补打

付款人	户名	源资信息科技（上海）有限公司	收款人	户名	广西中医药大学
	账号	1001242709300376015		账号	621057498215
	开户银行	工行虹桥开发区支行		开户银行	中国银行股份有限公司南宁市明秀东支行
金额		¥26,240.00元	金额（大写）		人民币 贰万陆仟贰佰肆拾元整
摘要		履约保证金	业务（产品）种类		跨行发报
用途					
交易流水号		58852745	时间戳		2026-05-18-17.39.20.173813
		备注： 附言：指令编号：HQP922049966956 提交人：TRII1.c.1001 最终授权人：TRII2.c.1001			
		验证码：HQVnrj2SjlVCKFWEA4wjmzEUuTM=			
记账网点		06889	记账柜员	00012	记账日期 2026年05月18日

重要提示：

1.如果您是收款方,请到工行网站www.icbc.com.cn电子回单验证处进行回单验证。2.本回单不作为收款方发货依据,并请勿重复记账。3.您可以选择发送邮件,将此电子回单发送给指定的接收人。

【打印回单】【发到邮箱】【关闭窗口】