Kompletný balík SCHRÖDINGER Suite v počte 25 licenčných tokenov na 5 rokov

alebo ekvivalentný softvér zabezpečujúci:

štúdium interakcií malých molekúl s proteínmi metódou molekulového dokovania, na štúdium interakcií povrchov a chemicky modifikovaných povrchov s biologickými makromolekulami, na výpočty väzobných energií malých molekúl s proteínmi, a pri štúdiu štruktúry enzýmov a ich enzymatických reakcií pomocou pokročilých QM/MM metód.

Softvér musí obsahovať implementáciu radu výpočtových techník:

→ modul na prípravu modelov polymérnych povrchov pre periodické a aj pre neperiodické systémy a ich predprípravu pre molekulové simulácie. V rámci modulu sa musia dať pripravovať aj chemicky modifikované povrchy.
→ modul na homológne modelovanie trojrozmerných štruktúr biologických makromolekúl na základe ich podobnosti s už publikovanými trojrozmernými štruktúrami a ich prípravu pre ďalšie molekulové simulácie.
→ modul pre molekulové dokovanie, ktorý dokáže zahrnúť vzájomné ovplyvnenie medzi ligandom a receptorom (polarizáciu) pomocou dát získaných z kvantovo mechanických výpočtov so schopnosťou predikovať hodnoty väzobných afinít s vysokou presnosťou, ktorá je dôležitá pre dosiahnutie čo najlepšej zhody s experimentálnymi hodnotami väzobných afinít.
→ musí poskytovať vysoko rýchle a efektívne nástroje pre virtuálny skríning, ktoré slúžia na hľadanie potenciálnych liečiv - niekoľkostupňový hiearchický prescreening (tzv. docking 'funnel'), ktorý umožňuje rýchle vyhľadanie potenciálnych ligandov v databáze veľkého množstva molekúl v rámci rozsiahlych databáz molekúl.
→ musí obsahovať unikátnu implementáciu metódy pre hybridné QM/MM výpočty,
→ musí obsahovať intuitívne grafické rozhranie slúžiace na prípravu vstupných súborov pre výpočty a analýzu výstupných súborov so širokou podporou výpočtových programov (musí byť podpora programového balíka pre molekulárne dynamické simulácie AMBER, ktorý je objednávateľom využívaný v rámci molekulovo dynamických simulácii)
→ Softvér predstavuje unifikované prostredie, ktoré prepája v rámci suite všetky dostupné výpočtové programy, obsahuje vývojové a dizajnérske prostredie pre široké spektrum chemických látok od malých molekúl až po biomakromolekuly a polymérne povrchy vrátene implementácie rady výpočtových techník potrebných na plnenie cieľov objednávateľa