

Avviso Pubblico, ex art. 66 D.Lgs. n. 50/2016 e s.m.i., per la verifica dell'effettiva sussistenza del presupposto dell'assenza di concorrenza per motivi tecnici con riferimento alla suite Software "Small Molecule Drug Discovery e Suite Biologics"

- La Fondazione Ri.MED (la Fondazione) ha necessità di procedere all'acquisto della **suite Software "Small Molecule Drug Discovery e Suite Biologics" dell'impresa Schrödinger per il gruppo di Molecular Informatics della Fondazione Ri.MED**;
- L'approvvigionamento in menzione è finanziato nell'ambito del "Fondo investimenti" istituito in base all'art. 1, comma 140, della legge 11 dicembre 2016, n. 232, e s.m.i., presso il Ministero dell'economia e delle finanze per il finanziamento degli investimenti e dello sviluppo infrastrutturale nel Paese (Finanziamento "Casa Italia");
- La Fondazione ha motivo di ritenere che il suddetto software sia l'unico in grado di soddisfare le specifiche esigenze ricollegate alle attività di ricerca svolte presso il Laboratorio di Molecular Informatics. La piattaforma Schrödinger (Biologics + Drug Design) permette l'integrazione di tecniche computazionali innovative applicabili sia agli aspetti classici del drug design, che alla progettazione di farmaci biologici. La suite Biologics risulta ad oggi l'unica suite computazionale interamente ideata per guidare in modo razionale la progettazione molecolare di prodotti biologici, attraverso flussi di lavoro creati dall'utente e che sfruttano le più innovative tecnologie di machine learning e che sfruttano il campo di forza OPLS3, già in uso presso la Fondazione. Attraverso l'uso di tale piattaforma, risulta infatti possibile la progettazione e l'ingegnerizzazione ad hoc di proteine, lo studio delle interfacce proteina-proteina e la modellazione di anticorpi. Presenta, inoltre, le seguenti caratteristiche, indispensabili per l'attività di ricerca della Fondazione, che, nel loro insieme, ne caratterizzano l'infungibilità:

- *il software Schrödinger, è attualmente in uso presso la fondazione dal 2016 e durante gli ultimi 4 anni sono stati effettuati calcoli sui progetti di maggior interesse per la Fondazione. Tali calcoli hanno prodotto dei risultati intermedi che nei prossimi anni dovranno essere riutilizzati nella prosecuzione degli studi di drug design nelle campagne di drug discovery già avviate. Ai fini di una continuità sperimentale e per motivi legati alla riproducibilità dei risultati, i dati prodotti dai calcoli pregressi necessitano di analisi sulla stessa piattaforma tecnologica e con identici parametri teorici. Inoltre, i campi di forza utilizzati dalla suite Schrödinger, ad oggi tra i migliori nel campo della drug design, sono di proprietà della casa madre e non sono compatibili con altri campi in uso, come dimostrato da evidenze di letteratura (J. Chem. Theory Comput. 2016, 12, 1, 281–296; J. Chem. Theory Comput., 2019, 1863–1874);*
- *integrazione con i sistemi di biologics design (ad oggi, sul mercato, risulta l'unico sistema integrato per calcoli teorici di modellamento di small molecules e prodotti biologici, incluso un algoritmo di docking proteina-proteina con campo di forza OPLS3, compatibile con i precedenti risultati intermedi di calcoli eseguiti in Fondazione). Poiché ad oggi la Fondazione Ri.MED risulta impegnata in progetti di ricerca finalizzati al disegno parallelo di farmaci chimici e biologici, sia su target canonici che su interazioni proteina-proteina, risulta necessaria una piattaforma*

software che consenta di utilizzare le stesse parametrizzazioni per la progettazione razionale di small molecules e biologici (es. Antibody modeling) sui diversi target oggetto di studio.

- *la capacità di effettuare calcoli di virtual screening sfruttando algoritmi di shape analysis già compilati per andare su GPU, aspetto che, considerate le esigenze di drug discovery della Fondazione, risulta di fondamentale importanza per effettuare screening di librerie di 10 milioni di molecole in tempi rapidi. Tali algoritmi sono di proprietà della casa madre e non disponibili su altre suite di molecular modeling.*

- Il valore della fornitura del software Schroedinger ammonta a presunti \$230.000 (USD) pari a circa € 194.700 oltre IVA.
- L'Impresa Schrödinger LLC, Portland, Oregon, risulta essere l'unica autorizzata a promuovere, commercializzare ed offrire assistenza relativamente alla suite software "**Small Molecule Drug Discovery e Suite Biologics**".

Con il presente avviso pubblico

- la Fondazione rende nota la circostanza di ritenere che la scelta del contraente per l'appalto in argomento possa essere effettuata mediante procedura negoziata senza previa pubblicazione di un bando di gara, sussistendo i presupposti di cui all' art. 63, comma 2, lett. b), n. 2), D. Lgs. n. 50/2016 e s.m.i.. Tale circostanza troverebbe fondamento e giustificazione in tutto quanto analiticamente specificato al terzo punto delle superiori premesse, che qui si intende integralmente trascritto;
- la Fondazione intende, altresì, consultare il mercato al fine di conoscere se, diversamente dalle informazioni in possesso della Fondazione medesima, vi siano altri operatori economici, diversi da quello sopra menzionato, che possano fornire un prodotto alternativo e funzionalmente equivalente a quello sopra specificato,

2

Tanto premesso,

Si invita

ogni operatore economico, che ritenga di essere nelle condizioni di fornire un software alternativo e funzionalmente equivalente (a quello sopra indicato), a presentare la propria candidatura, avendo cura di allegare alla stessa ampia e dettagliata documentazione tecnica atta a dimostrare l'effettiva idoneità del software alternativo proposto a soddisfare le esigenze della Fondazione, in ragione del possesso di caratteristiche tecniche tali da garantire standard funzionali e prestazionali equivalenti o superiori a quelli sopra specificati.

Si rappresenta che il presente avviso è rivolto esclusivamente alle Imprese diverse da quella espressamente sopra indicata. Conseguentemente, l'impresa individuata quale potenziale fornitore per l'appalto in argomento non dovrà, in tale fase, presentare o inviare alcun documento.

La suddetta documentazione dovrà essere inviata, entro il termine perentorio delle **ore 13:00 dell'11**

dicembre 2020, all'indirizzo di posta elettronica certificata della Fondazione Ri.MED acquistirimed@pec.it, indicando nel campo oggetto la dicitura **“Documentazione software equivalente alla suite *“Small Molecule Drug Discovery e Suite Biologics” dell'impresa Schrödinger*”**.

Si segnala, al riguardo, che il menzionato indirizzo di posta elettronica è abilitato soltanto alla ricezione di posta elettronica certificata (non saranno pertanto in alcun modo ricevibili e-mail trasmesse mediante posta elettronica non certificata).

Trascorso il suddetto termine, in assenza di riscontri da parte del mercato o qualora i riscontri pervenuti non dovessero, con provvedimento motivato, essere valutati favorevolmente dai competenti Uffici della Fondazione, si riterrà confermata la sussistenza del presupposto dell'assenza di concorrenza per motivi tecnici.

In tale ipotesi, la Fondazione intende, fin d'ora, manifestare l'intenzione di stipulare con l'Impresa sopra indicata il relativo contratto, previa negoziazione delle condizioni contrattuali, ai sensi dell'art. 63, comma 2, lett. b) del D. Lgs. n. 50/2016.

Il giorno 26 novembre 2020 il presente avviso è stato pubblicato sul sito istituzionale della Fondazione <http://www.fondazionerimed.eu> nella sezione *“bandi di gara”* e sul sito del M.I.T. (<https://www.serviziocontrattipubblici.it>).

Palermo, 26 novembre 2020

F.to Il Responsabile Unico del Procedimento

Dott. Renato Saverino