



Progetto - Hub Life Science – Terapia Avanzata (LSH-TA) PNC-E3-2022-23683269- finanziato dal Ministero della Salute nell'ambito del Piano Nazionale Complementare Ecosistema Innovativo della Salute

San Giovanni Rotondo, 18.05.2026

Oggetto: decisione a contrarre per l'affidamento diretto avente ad oggetto l'acquisizione di software e servizi nell'ambito del progetto "Hub Life Science – Terapia Avanzata (LSH-TA) Ecosistema della salute".

PNC-E3-2022-23683269 PNC-HLS-TA, CUP I23C22000870001, RDA/CIG 42596.

Progetto finanziato dal Ministero della Salute nell'ambito del Piano Nazionale Complementare Ecosistema Innovativo della Salute" - Codice univoco investimento: PNC-E.3

DETERMINA N. 220 DEL GIORNO 18.05.2026

IL DIRETTORE GENERALE

VISTO il Decreto Legislativo del 31 maggio 2021, n. 77 *"Governance del Piano nazionale di ripresa e resilienza e prime misure di rafforzamento delle strutture amministrative e di accelerazione e snellimento delle procedure"*;

VISTI i principi generali del D. Lgs. N. 36 del 31 marzo 2023 e, in particolare, i principi del risultato, della fiducia e dell'accesso al mercato;

VISTO il principio del D.Lgs. n. 36 del 31 marzo 2023, richiamato all'art. 17 che detta che *"1. Prima dell'avvio delle procedure di affidamento dei contratti pubblici, le stazioni appaltanti e gli enti concedenti, con apposito atto, adottano la decisione di contrarre individuando gli elementi essenziali del contratto e i criteri di selezione degli operatori economici e delle offerte. 2. In caso di affidamento diretto, l'atto di cui al comma 1 individua l'oggetto, l'importo e il contraente, unitamente alle ragioni della sua scelta, ai requisiti di carattere generale e, se necessari, a quelli inerenti alla capacità economico-finanziaria e tecnico-professionale. (...)"*;

VISTO il principio del D.Lgs. n. 36 del 31 marzo 2023, secondo cui *Il contratto è stipulato, a pena di nullità, in forma scritta;*

VISTO l'articolo 49 del D.Lgs. n. 36/2023, rubricato *"Principio di rotazione"*, che sancisce il divieto di affidamento e aggiudicazione di un appalto al contraente uscente nei casi in cui due consecutivi affidamenti abbiano a oggetto una commessa rientrante nello stesso settore merceologico, oppure nella stessa categoria di opere, oppure nello stesso settore di servizi;

CONSIDERATO che, ai sensi dell'articolo 49 del D.Lgs. 36/2023, è possibile derogare al principio di rotazione per gli affidamenti diretti di importo inferiore a euro 5.000,00 (iva esclusa); in casi motivati con riferimento alla struttura del mercato e alla effettiva assenza di alternative, nonché di accurata esecuzione del precedente contratto, di talché il contraente uscente può essere reinvitato o essere individuato quale affidatario diretto; per i contratti affidati con le procedure di cui all'articolo 50, comma 1, lettere c), d) ed e) quando l'indagine di mercato sia stata effettuata senza porre limiti al numero di operatori economici in possesso dei requisiti richiesti da invitare alla successiva procedura negoziata;

VISTO l'art. 50 del D.Lgs. n. 36/2023 a tenore del quale l'affidamento dei contratti sottosoglia avviene con le seguenti modalità:
a) affidamento diretto per lavori di importo inferiore a 150.000 euro, anche senza consultazione di più operatori economici, assicurando che siano scelti soggetti in possesso di documentate esperienze pregresse idonee all'esecuzione delle prestazioni contrattuali anche individuati tra gli iscritti in elenchi o albi istituiti dalla stazione appaltante;



Progetto - Hub Life Science – Terapia Avanzata (LSH-TA) PNC-E3-2022-23683269- finanziato dal Ministero della Salute nell'ambito del Piano Nazionale Complementare Ecosistema Innovativo della Salute

b) affidamento diretto dei servizi e forniture, ivi compresi i servizi di ingegneria e architettura e l'attività di progettazione, di importo inferiore a 140.000 euro, anche senza consultazione di più operatori economici, assicurando che siano scelti soggetti in possesso di documentate esperienze pregresse idonee all'esecuzione delle prestazioni contrattuali, anche individuati tra gli iscritti in elenchi o albi istituiti dalla stazione appaltante (omissis)".

VISTO l'art. 52 del D.Lgs. n. 36/2023 che introduce rilevanti semplificazioni delle modalità per la verifica dei requisiti in riferimento agli affidamenti diretti di importo inferiore a 40.000,00 €, per i quali l'affidatario deve attestare con dichiarazione sostitutiva dell'atto di notorietà la sussistenza dei requisiti di carattere generale e speciale richiesti per l'affidamento; la Stazione appaltante, in luogo di un controllo a carico di tutti gli affidatari, è obbligata solo a verificare le dichiarazioni tramite sorteggio di un campione individuato con modalità predeterminate ogni anno;

VISTO che l'intervento è finanziato nell'ambito del Piano Nazionale di Ripresa e Resilienza (PNRR), trovano applicazione le disposizioni di cui agli articoli 47 e 48 del D.L. 77/2021, convertito con modificazioni nella L. 108/2021 che consentono il ricorso a procedure semplificate di affidamento;

VISTA la coerenza con gli obiettivi della Missione 6 - Salute, Componente 2 -Innovazione, ricerca e digitalizzazione del servizio sanitario nazionale del PNRR e il rispetto dei principi del "non arrecare un danno significativo" contro l'ambiente (*DNSH*), *Tagging* clima e digitale, *parità di genere*, protezione e valorizzazione dei giovani e superamento dei divari territoriali;

VISTA la coerenza con l'obbligo di conseguimento di target e milestone connessi alla Missione 6 - Salute, Componente 2 - Innovazione, ricerca e digitalizzazione del servizio sanitario nazionale del PNRR, degli obiettivi finanziari, prevedendo la revoca dei contributi, in caso di mancato raggiungimento degli obiettivi previsti, nei tempi assegnati;

VISTO che ai sensi dell'art. 9 del Regolamento (UE) 2021/241 e delle disposizioni nazionali di attuazione (D.L. 77/2021 e Circolare RGS n. 33/2021), l'affidamento è effettuato nel rispetto del principio di *addizionalità*, in quanto la spesa prevista rappresenta un investimento aggiuntivo e non sostitutivo rispetto alla spesa ordinaria dell'Ente;

VISTO che l'affidamento è attuato nel rispetto del principio di *tutela degli interessi finanziari dell'Unione Europea*, ai sensi dell'art. 22 del Regolamento (UE) 2021/241, dell'art. 325 del TFUE e dell'art. 6 del D.L. 77/2021, convertito nella L. 108/2021. L'amministrazione garantisce la corretta gestione e tracciabilità delle risorse PNRR, l'assenza di conflitti di interesse, di fenomeni corruttivi e di doppio finanziamento, nonché l'adozione di misure di prevenzione e controllo in conformità alle indicazioni della Ragioneria Generale dello Stato;

VISTO che l'affidamento è disposto nel rispetto del principio di pari opportunità, inclusione e non discriminazione, assicurando la promozione della parità di genere, dell'occupazione giovanile e dell'inclusione delle persone con disabilità, in conformità con quanto previsto dall'art. 47 del D.L. 77/2021, convertito nella L. 108/2021, e dall'art. 18, par. 4, lett. q) del Regolamento (UE) 2021/241;

VISTO l'articolo 76 del D.Lgs. n. 36/2023 rubricato "(Procedura negoziata senza pubblicazione di un bando)";

VISTA la richiesta per l'affidamento dei seguenti articoli:

Quantità	Descrizione
1	Desmond GPU Floating License
1	KNIME Access License
1	Maestro Access License
1	OPLS Access License
500	Compounds – Hosted Academic FEP+
1	FEP Schrodinger Online Course - Student
10	Tokens for interchangeable library including (Deep)AutoQSAR, Canvas, ConfGen, Core Hopping, Epik, Fieldbased QSAR, Glide, Jaguar, Jaguar pKa, LigPrep, MacroModel, Membrane Permeability, P450 SOM Prediction, Phase, Shap Screening, Prime, PrimeX, QikProp, QSite, SiteMap
1	BioLuminate Floating License
500	Compound – Hosted Academic FEP+
500	Compound – Hosted Academic FEP+

nell'ambito del progetto "HUB LIFE SCIENCE – TERAPIA AVANZATA (LSH-TA)", PNC-E3-2022-23683269 PNC-HLS-TA, CUP 123C22000870001, RDA/CIG 42596 finanziato dal Ministero della Salute nell'ambito del Piano Nazionale Complementare Ecosistema Innovativo della Salute - Codice univoco investimento: PNC-E.3, si precisa di seguito quanto riportato nella dichiarazione di unicità o nella documentazione aggiuntiva:

CONSIDERATO CHE

1. Lo scopo del progetto è sviluppare prodotti innovativi per terapie avanzate. A tal fine, è previsto il design *in-silico* tramite simulazioni di materiali a base peptidica. I software attualmente disponibili sul mercato presentano limitazioni sia nel design *in-silico* e sia nell'analisi di materiali di origine biologica. A titolo esemplificativo, Ad esempio, molti di questi strumenti non consentono la simulazione di sistemi complessi come le membrane biologiche oppure non supportano la dinamica molecolare su GPU. Questi aspetti riducono notevolmente l'efficienza e la precisione delle simulazioni necessarie per il progetto. Il software oggetto della richiesta soddisfa pienamente le esigenze progettuali, poiché è l'unico in grado di supportare simulazioni complesse come la dinamica molecolare, il virtual screening e il docking. Per le innanzi spiegate ragioni di natura tecnica, le procedure anzi dette sono possibile solo ed esclusivamente grazie al supporto di Desmond GPU, un motore avanzato per la simulazione di sistemi biologici come proteine e membrane biologiche di cui il pacchetto software oggetto di fornitura è in modo esclusivo dotato.
2. L'acquisizione dei servizi aggiuntivi forniti da Schrödinger è necessaria per garantire il completamento del progetto e l'integrazione delle diverse fasi di design, simulazione e validazione dei materiali peptidici. In particolare, il pacchetto di **10 Tokens per la libreria intercambiabile** consente l'accesso a moduli avanzati indispensabili per l'analisi computazionale multiscala, tra cui **Glide** e **Prime** per le simulazioni di docking e modellazione strutturale, **(Deep)AutoQSAR** e **Field-Based QSAR** per la costruzione di modelli

predittivi basati su machine learning, **Epik** e **Jaguar pKa** per la determinazione accurata dello stato di protonazione, **MacroModel** e **ConfGen** per l'ottimizzazione conformazionale, e **Membrane Permeability** e **QikProp** per la valutazione delle proprietà farmacocinetiche. Tali strumenti sono strettamente integrati con Desmond GPU e permettono di passare senza soluzione di continuità dalla simulazione molecolare al design razionale delle sequenze peptidiche e alla predizione delle loro proprietà biologiche. Inoltre, l'accesso a **500 compound per il servizio Hosted Academic FEP+** è essenziale per eseguire calcoli di **Free Energy Perturbation** ad alta accuratezza, consentendo la valutazione quantitativa dell'affinità di legame tra i peptidi progettati e i loro target molecolari. Queste analisi sono fondamentali per la selezione in-silico dei candidati più promettenti e per la successiva validazione sperimentale, rendendo l'intero workflow computazionale completo, efficiente e coerente con gli obiettivi scientifici del progetto.

3. le dichiarazioni di cui ai punti c. e d. delle premesse, confermano l'assenza sul mercato di prodotti o soluzioni in grado di soddisfare integralmente i seguenti requisiti tecnici, funzionali e ambientali, in particolare per l'esigenza di progettazione di funzionalizzazioni chimiche per sistemi peptidici utilizzati in ingegneria tissutale, ritenuti oggettivamente indispensabili e non surrogabili per la corretta esecuzione del Progetto in epigrafe:

VISTI

- Il Decreto Legislativo 31 marzo 2023, n. 36 (Codice dei Contratti Pubblici) e, in particolare:
- L'art. 50, comma 1, lett. b), che disciplina l'affidamento diretto per forniture di importo inferiore a 140.000 euro;
- L'art. 76, comma 2, lett. b), che consente il ricorso alla procedura negoziata senza previa pubblicazione di un bando di gara qualora la fornitura, per ragioni di natura tecnica o attinenti alla tutela di diritti esclusivi, possa essere affidata a un solo operatore economico.
- La dichiarazione della ditta Schrödinger, LLC di esclusiva distribuzione del pacchetto di software oggetto di fornitura.
- La dichiarazione di unicità delle caratteristiche tecniche del pacchetto di software oggetto di fornitura, rimessa dalla ditta Schrödinger, LLC

Tutto ciò premesso e considerato, consapevole delle responsabilità e delle sanzioni penali previste dall'art. 76 del D.P.R. 445/2000 per le ipotesi di falsità in atti e dichiarazioni mendaci, il sottoscritto RUP

DICHIARA

l'infungibilità della fornitura relativa ai beni elencati in premesse, in quanto, per le ragioni tecniche e di tutela di diritti esclusivi sopra dettagliate, la ditta Schrödinger, LLC risulta essere l'unico operatore economico in grado di eseguire la fornitura del pacchetto di software segnatamente elencato in precedenza, dotato delle caratteristiche indispensabili e non surrogabili richieste per la corretta esecuzione del Progetto.

L'assenza di concorrenza non è il risultato di una definizione artificialmente restrittiva delle specifiche tecniche, ma la conseguenza oggettiva dell'unicità della soluzione tecnica e ambientale offerta, come confermato dalle dichiarazioni allegate rilasciate dalla ditta Schrödinger, LLC

Si ritiene pertanto legittimo, ai sensi della normativa vigente e nel rispetto dei principi di risultato, efficacia e buona amministrazione, procedere all'acquisto della suddetta fornitura mediante affidamento diretto alla ditta Schrödinger, LLC.



Progetto - Hub Life Science – Terapia Avanzata (LSH-TA) PNC-E3-2022-23683269- finanziato dal Ministero della Salute nell'ambito del Piano Nazionale Complementare Ecosistema Innovativo della Salute

- l'importo presunto per l'acquisto di software e servizi è pari ad **\$ 32.185,25 iva esclusa**;

RITENUTI i motivi, addotti nella richiesta sopracitata, rispondenti alle finalità di pubblico interesse perseguite dall'Amministrazione;

CONSIDERATA la nomina del **RUP**, nella persona del **Dott. Massimo Carella** (con determina del Direttore Generale n. 183 del 28/04/2025), quale Responsabile Unico di progetto perché in possesso dei requisiti professionali e dell'esperienza richieste dall'articolo 15 e dall'allegato 1.2 del D.Lgs. 36/2023;

DETERMINA

DI PROCEDERE, per i motivi indicati in premessa, all'acquisizione di software e servizi di cui sopra nell'ambito del progetto progetto "HUB LIFE SCIENCE – TERAPIA AVANZATA (LSH-TA)", **PNC-E3-2022-23683269 PNC-HLS-TA, CUP 123C22000870001, RDA/CIG 42596** finanziato dal Ministero della Salute nell'ambito del Piano Nazionale Complementare Ecosistema Innovativo della Salute - Codice univoco investimento: PNC-E.3 , mediante affidamento diretto ai sensi dell'art.50, comma 1, lett. b) del Codice all'operatore economico **Schrödinger LLC** con sede legale in **101 SW Main Street Suite 1300-97204 Portland Stato dell'Oregon (Stati Uniti)** C.F. US 10000000077, per un importo pari ad **\$ 32.185,25 iva esclusa**;

1. **DI STABILIRE** le seguenti condizioni contrattuali:

- a) il pagamento del servizio di cui sopra, verrà effettuato, entro 30 giorni naturali e consecutivi dalla ricezione di regolare fattura elettronica, trasmessa dall'operatore economico, dopo la regolare esecuzione delle prestazioni contrattuali;
- b) che, se in conseguenza della verifica, effettuata secondo le modalità predeterminate annualmente dall'amministrazione, non sarà confermato il possesso dei requisiti generali o speciali dichiarati, la stazione appaltante procederà alla risoluzione del contratto.

2. **DI AUTORIZZARE** l'imputazione dell'importo di **\$ 32.185,25 iva esclusa** sul conto di bilancio di seguito indicato: 69.0015.0015 SPESE GENERALI PER RICERCA.

IL DIRETTORE GENERALE
Gino Gumirato