



OSPEDALE Casa Sollievo della Sofferenza
ISTITUTO DI RICOVERO E CURA A CARATTERE SCIENTIFICO
OPERA DI SAN PIO DA PIETRELCINA
Viale Cappuccini snc - SAN GIOVANNI ROTONDO (FG)

DICHIARAZIONE DI UNICITA'

PER PROGETTI FINANZIATI DAI FONDI SIE-FSC-FESR E DA ENTI NAZIONALI ED INTERNAZIONALI

San Giovanni Rotondo, __ Novembre 2025

Al Responsabile Amministrativo

Dott. Michele Giuliani

DICHIARAZIONE DI UNICITA'

(resa ai sensi degli artt. 47 e 76 del D.P.R. 28 dicembre 2000, n. 445, e ai fini dell'applicazione dell'art. 76, comma 2, lett. b) del D.Lgs. 31 marzo 2023, n. 36)

Il sottoscritto Dott. Massimo Carella, codice fiscale CRLMSM68P05I158D, in qualità di Responsabile Unico del Progetto (RUP), identificato con i seguenti codici:

- Titolo: "Hub Life Science – Terapia Avanzata"
- Codice identificativo e acronimo: PNC-E3-2022-23683269;
- Acronimo: PNC-HLS-TA;
- Codice commessa: RPNC22UPTA01,
- CUP: I23C22000870001;
- Finanziato nell'ambito del Piano Nazionale Complementare (PNC); Missione 6 (Salute), Componente 2: Innovazione, ricerca e digitalizzazione del servizio sanitario nazionale; Investimento E.3 "Ecosistema Innovativo della Salute" (ovvero PNC-E3).

in relazione alla procedura di affidamento diretto della fornitura di cui alla richiesta di acquisto n. 42596 del 23/10/2025, per un importo stimato di € 25.900,00, oltre IVA,

PREMESSO CHE

- a. per l'attuazione delle attività sperimentali previste dal Progetto in epigrafe, si rende necessario procedere all'acquisizione del pacchetto software costituito dalle parti di seguito segnatamente elencate ed ai servizi di analisi appresso specificati, con affidamento diretto della fornitura alla ditta Schrödinger, LLC, con sede negli Stati Uniti d'America, in Portland, stato dell'Oregon, all'indirizzo 101 SW Main Street, Suite 1300, 97204:

Software richiesti:

- N.1 Desmond GPU Floating License
- N.1 KNIME Access License
- N.1 Maestro Access License
- N.1 OPLS Access License
- N.1 FEP Schrodinger Online Course – Student
- N.1 BioLuminate Floating License



OSPEDALE Casa Sollievo della Sofferenza
ISTITUTO DI RICOVERO E CURA A CARATTERE SCIENTIFICO
OPERA DI SAN PIO DA PIETRELCINA
Viale Cappuccini snc -SAN GIOVANNI ROTONDO (FG)

DICHIARAZIONE DI UNICITA'

PER PROGETTI FINANZIATI DAI FONDI SIE-FSC-FESR E DA ENTI NAZIONALI ED INTERNAZIONALI

San Giovanni Rotondo, __ Novembre 2025

Servizi richiesti:

- N.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,Shape Screening, Prime, PrimeX, QikProp, QSite,SiteMap
 - N.500 Compounds – Hosted Academic FEP+
 - N.500 Compound – Hosted Academic FEP+
 - N.500 Compound – Hosted Academic FEP+
- b. L'importo stimato dell'intera fornitura, in ragione di € 25.900,00, oltre IVA, rientra nella soglia di valore stabilita dall'art. 50, comma 1, lett. b) del D.Lgs. 36/2023, che consente di procedere tramite affidamento diretto.
- c. Agli atti è stata acquisita la dichiarazione della ditta Schrödinger, LLC, con la quale la stessa attesta di essere distributore in esclusiva per dei beni elencati al precedente punto a.
- d. Altresì, agli atti è stata acquisita la dichiarazione con la quale la ditta Schrödinger, LLC attesta l'unicità delle caratteristiche tecniche del pacchetto software oggetto di fornitura, ritenute imprescindibili per l'esecuzione delle procedure sperimentali previste dal Progetto.

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



OSPEDALE Casa Sollievo della Sofferenza
ISTITUTO DI RICOVERO E CURA A CARATTERE SCIENTIFICO
OPERA DI SAN PIO DA PIETRELcina
Viale Cappuccini snc -SAN GIOVANNI ROTONDO (FG)

DICHIARAZIONE DI UNICITA'

PER PROGETTI FINANZIATI DAI FONDI SIE-FSC-FESR E DA ENTI NAZIONALI ED INTERNAZIONALI

San Giovanni Rotondo, __ Novembre 2025

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



OSPEDALE Casa Sollievo della Sofferenza
ISTITUTO DI RICOVERO E CURA A CARATTERE SCIENTIFICO
OPERA DI SAN PIO DA PIETRELCINA
Viale Cappuccini snc - SAN GIOVANNI ROTONDO (FG)

DICHIARAZIONE DI UNICITA'

PER PROGETTI FINANZIATI DAI FONDI SIE-FSC-FESR E DA ENTI NAZIONALI ED INTERNAZIONALI

San Giovanni Rotondo, __ Novembre 2025

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.

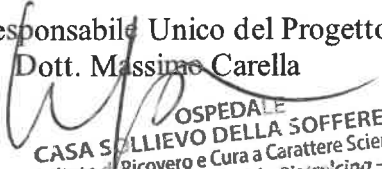
L'assenza di concorrenza non è il risultato di una definizione artificialmente restrittiva delle specifiche tecniche, ma la conseguenza oggettiva dell'unicità della soluzione tecnica e ambientale offerta, come confermato dalle dichiarazioni allegate rilasciate dalla ditta Schrödinger, LLC

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.

San Giovanni Rotondo, 26 Novembre 2025

Allegati:

Il Responsabile Unico del Progetto
Dott. Massimo Carella


OSPEDALE
CASA SOLLIEVO DELLA SOFFERENZA
Istituto di Ricovero e Cura a Carattere Scientifico
- Opera di San Pio da Pietrelcina -
SAN GIOVANNI ROTONDO (FG)
Il Vicedirettore Scientifico
Dott. Massimo Carella