INFORME DEL LABORATORI DE TARGETED PROTEIN DEGRADATION AND DRUG DISCOVERY (TPD & DD) DE L'IRB BARCELONA, SOBRE LA NECESSITAT DE CONTRACTAR LA RENOVACIÓ DE LES LLICÈNCIES DE LA SUITE DE PROGRAMARI SCHRÖDINGER

L'IRB Barcelona té per objectiu contribuir a la millora de la qualitat de vida per mitjà de l'aplicació dels avenços en l'àmbit de la ciència biomèdica bàsica i aplicada, i promoure la recerca multidisciplinària d'excel·lència en la interfície entre la biologia i la química, així com fomentar la col·laboració entre les entitats locals i els instituts de recerca institucionals, impulsant i coordinant la recerca interdisciplinària en biomedicina.

El laboratori de la Dra. Cristina Mayor, denominat Targeted Protein Degradation and Drug Discovery (en endavant, TPD & DD), té la necessitat de renovar les llicències d'un programari *(software)* de simulació biomolecular que permeti als grups de recerca modelitzar sistemes bioquímics amb resolució atòmica i també estudiar en detall l'estructura de proteïnes i àcids nucleics i utilitzar aquestes estructures per dissenyar nous fàrmacs. És essencial per a la recerca del laboratori TPD & DD en descobriment de fàrmacs computacional, la disposició d'eines de dockatge molecular, cribratge virtual i disseny basat en estructura capdavanteres en la indústria, tot en una plataforma integrada i validada.

En aquest sentit, el programari científic de la suite Schrödinger, de propietat de l'empresa SCHRÖDINGER, INC.; compleix específicament amb els requisits anteriorment mencionats. Essent aquesta la marca del programari que es fa servir actualment en el laboratori TPD & DD, no és possible adoptar cap altre programari actual, ja que no hi ha alternativa comparable que ofereixi una solució tan completa i fluida per al modelatge de petites molècules, l'avaluació de la unió lligand-proteïna i l'acceleració de projectes de descobriment de fàrmacs, fet que fa que la llicència per la utilització del programari científic de la suite Schrödinger sigui imprescindible per mantenir la nostra competitivitat i productivitat científica. En particular, Glide destaca per la seva alta precisió i rendiment en la predicció d'interaccions entre lligand i proteïna, fiabilitat científica i fluxos de treball únics de principi a fi, en ús actualment al laboratori. Addicionalment la plataforma de Schrödinger també ofereix el programari següent que es requereix pel TPD & DD lab:

a) Ligprep: permet generar amb precisió models 3D de compostos la qual cosa és essencial per docking.
b) Maestro: és un suite on córrer tots els diferents programes amb una GUI molt intuïtiva.
c) PrimeX, EpiX, SiteMap: són softwares que serveixen per avaluar i preparar proteïnes per *docking* i altres propòsits com *molecular dynamics.*
d) Desmond: serveix per realitzar *molecular dynamics simulations.*
e) Jaguar: programa per a càlculs de mecànica quàntica.

En tot cas, en el mercat actual, aquestes llicències es poden distribuir per diverses empreses. A més a més, en el remot cas que fos possible un canvi de marca a un altre tipus de programari similar, suposaria, a banda de la pèrdua de funcionalitats específiques de la suite Schrödinger, que el laboratori necessita i, d'altra banda, d'una

inversió desproporcionada de recursos econòmics i tècnics, per la correcta transferència de dades i resultats, així com processos; primordialment, suposaria una actual incompatibilitat amb els sistemes i metodologia actual del laboratori; i, a més a més, per últim, generaria una necessària paralització per l'adaptació i traspàs d'informació així com per a la formació del personal tècnic.

S'aprecia doncs, per tot l'exposat anteriorment, tant la necessitat de la compra com les raons per les que aquests productes han de ser d'aquest caire tècnic, que es desenvoluparà en detall al Plec de Prescripcions Tècniques.

Considerant tot l'exposat anteriorment, es sol·licita a l'òrgan de contractació de l'IRB Barcelona, l'inici d'un procediment per a la contractació de la renovació de les llicències programari de la suite de Schrödinger per un pressupost base de licitació de 4.520,00.-$ (US DOLLARS), IVA exclòs, i per un valor estimat de 9.944,00.-$ (IVA exclòs) –incloent-hi una possible pròrroga d'un any i la previsió d'un 20% de modificació.

A Barcelona, en data de la signatura electrònica.

Dra. Cristina Mayor
TPD & DD Group Leader
Fundació Institut de Recerca Biomèdica (IRB Barcelona)