

Spettabile  
**DIP. SCIENZE DELLA SALUTE**  
**UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DEL PIEMONTE**  
**ORIENTALE "AMEDEO AVOGADRO"**  
 Via Solaroli, 17  
 28100 Novara (NO)  
 Partita I.V.A. 01943490027  
C.a. Prof.ssa Antonia Follenzi

**Lugano, 22 maggio 2025**

**Oggetto: Preventivo fornitura servizio di ricerca di possibili interattori molecolari proteici della proteina "fattore VIII (FVIII)" alla base dei suoi effetti extracoagulativi mediante il software SPILLO-PBSS.**

Descrizione del servizio	Prezzo
<ul style="list-style-type: none"> <li>- fase 1: studio della problematica sottesa alla proteina fattore VIII (Protein name: Coagulation factor VIII – Gene: F8 – UniProtKB AC: P00451) e studio di letteratura;</li> <li>- fase 2: preparazione mediante tecniche di molecular modelling di una prima reference binding interface (RBI) per il fattore VIII;</li> <li>- fase 3: predisposizione di uno small database (200 entries) contenente tutte le strutture 3D di Neuropilina (NRP-1 ed NRP-2 umane e murine) disponibili nell’RCSB Protein Data Bank (PDB) e altre strutture 3D di proteine da usare come controlli negativi;</li> <li>- fase 4: esecuzione calcolo di virtual screening dello small database di strutture proteiche (preparato nella fase 3) mediante il software SPILLO-PBSS utilizzando la prima RBI (preparata nella fase 2);</li> <li>- fase 5: analisi dei risultati e individuazione di possibili complessi Neuropilina-FVIII;</li> <li>- fase 6: ottimizzazione dei complessi a più alto score ottenuti dal calcolo e generazione di ‘starting-points’ per successivi studi di dinamica molecolare;</li> <li>- fase 7: predisposizione report contenente tutti i dati relativi al lavoro svolto e ai risultati ottenuti;</li> </ul>	<p><b>Attività A</b>            (10-15            giorni            lavorativi)            € 4000,00            (Non            soggetto a            IVA)</p>
<ul style="list-style-type: none"> <li>- fase 8: predisposizione/aggiornamento e testing di un database di strutture 3D proteiche costituito dal proteoma strutturale disponibile nell’RCSB PDB (include ridondanze di sequenza) degli organismi <i>Homo sapiens</i> (73400+ entries), <i>Mus musculus</i> (9700+ entries), <i>Rattus norvegicus</i> (4300+ entries) (strutture 3D provenienti da esperimenti di X-ray diffraction, solution NMR e cryo-EM) per un totale di 87400+ strutture 3D (Aprile 2025);</li> <li>- fase 9: esecuzione calcolo di virtual screening del database di strutture proteiche (preparato nella fase 8) mediante il software SPILLO-PBSS utilizzando la prima RBI (preparata nella fase 2);</li> <li>- fase 10: analisi ed elaborazione dei risultati ottenuti relativi alle top-ranked target proteins risultanti dal calcolo (effettuato nella fase 9);</li> <li>- fase 11: interpretazione dei risultati ottenuti mediante analisi preliminare di letteratura scientifica;</li> <li>- fase 12: predisposizione report contenente tutti i dati relativi al lavoro svolto e ai risultati ottenuti;</li> </ul>	<p><b>Attività A+B</b>            (35-40            giorni            lavorativi)            € 9000,00            (Non soggetto a            IVA)</p>
<ul style="list-style-type: none"> <li>- fase 13: preparazione mediante tecniche di molecular modelling di una seconda reference binding interface (RBI) per il fattore VIII;</li> <li>- fase 14: esecuzione calcolo di virtual screening del database di strutture proteiche (preparato nella fase 8) mediante il software SPILLO-PBSS utilizzando la seconda RBI (preparata nella fase 13);</li> <li>- fase 15: analisi ed elaborazione dei risultati ottenuti relativi alle top-ranked target proteins risultanti dal calcolo (effettuato nella fase 14);</li> <li>- fase 16: interpretazione dei risultati ottenuti mediante analisi preliminare di letteratura scientifica;</li> <li>- fase 17: predisposizione report contenente tutti i dati relativi al lavoro svolto e ai risultati ottenuti.</li> </ul>	<p><b>Attività A+B+C</b>            (60-65            giorni            lavorativi)            € 15000,00            (Non soggetto a            IVA)</p>

Validità del preventivo: 30 giorni