



MINISTÉRIO DA
CIÊNCIA, TECNOLOGIA
E INOVAÇÃO



LABORATÓRIO NACIONAL DE COMPUTAÇÃO CIENTÍFICA

Avenida Getúlio Vargas, 333, - Bairro Quitandinha,
CEP 25651-075, Petrópolis - RJ - <http://www.lncc.br>

AUTORIZAÇÃO DE COMPRA/SERVIÇO

INEXIGIBILIDADE DE LICITAÇÃO 240123 Nº 90021/2023

Processo Administrativo nº 01209.000206/2024-41

OBJETO

Fornecimento de licença, com direito de uso e com subscrição temporária de 36 (trinta e seis) meses, do software InfiniSee, contendo três mecanismos de busca (FTrees, SpaceLight e SpaceMACS) e o upgrade infinisee xREAL, visando a busca por similaridade molecular de novas moléculas em bases de dados comerciais contendo dezenas de bilhões de moléculas virtuais.

JUSTIFICATIVA

A necessidade de uso deste software foi verificada ao estudarmos como explorar as novas bibliotecas comerciais (ex, REAL Space da empresa Enamine e Galaxi) de moléculas virtuais contendo até trilhões de compostos, que estão disponíveis comercialmente e possuem alta probabilidade de acessibilidade sintética. O infinisee é uma das melhores ferramentas capazes de navegar em espaços químicos, encontrar moléculas análogas com similaridades químicas e/ou topológicas. Essa ferramenta permitirá aos projetos desenvolvidos no LNCC construir e investigar bibliotecas contendo milhões/bilhões de compostos focadas nos resultados de atracamento molecular para um determinado alvo molecular. É importante ressaltar que, com o novo upgrade do software (i.e., infinisee xREAL), é possível investigar um imenso espaço químico de 2,4 trilhões de moléculas. Após serem identificadas, as moléculas mais promissoras poderão ser facilmente compradas e posteriormente testadas experimentalmente.

AMPARO LEGAL

Inexigibilidade de Licitação, na forma do artigo Art. 74, inciso I da Lei nº 14.133/2021.

FORNECEDOR

BioSolveIT GmbH

VALOR TOTAL DA CONTRATAÇÃO:

R\$ 31.050,00 (trinta e um mil cinquenta reais).

DESPACHO

Após analisar o processo administrativo, **AUTORIZO** a presente contratação por Inexigibilidade de Licitação, nos termos do Art. 74, inciso I da Lei nº 14.133/2021.

Paulo César de Freitas Honorato
Coordenador de Gestão e Administração



Documento assinado eletronicamente por **Paulo César de Freitas Honorato, Coordenador de Gestão e Administração**, em 26/11/2024, às 16:53 (horário oficial de Brasília), com fundamento no § 3º do art. 4º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site <https://sei.mcti.gov.br/verifica.html>, informando o código verificador **12447145** e o código CRC **CB1C5495**.