PLEC DE PRESCRIPCIONS TÈCNIQUES PARTICULARS PER A LA CONTRACTACIÓ DEL SUBMINISTRAMENT DE REACTIUS METABOLÒMICS I ACCESSORIS PER A L'ANÀLISI DELS BIOMARCADORS DEL MEGA ASSAY PER PART DE THE METABOLOMICS INNOVATION CENTRE (TMIC)

EXPEDIENT 2023/16

El present plec té com a objecte descriure les característiques tècniques mínimes per l'adequat subministrament de reactius metabolomics i accessoris per a l'anàlisi dels biomarcadors del Mega Assay per part de the Metabolomics Innovation Centre (TMIC).

1. Objecte de contracte.

El material a adquirit consisteix en el fungible, estàndards isotòpics i altres reactius necessaris i únics en el seu format i amplitud metabòlica per a la quantificació validada de 600 metabòlits del metabolisme endogen i rutes metabòliques específiques, entre les quals es troben caracteritzats aminoàcids, lípids, acilcarnitines, àcids grassos, amines biogenes, àcids orgànics i àcids biliars. Així com accés als softwares específics desenvolupats pels proveïdors per a l'anàlisi i estudi.

Al desembre de 2022 es va adquirir el material prèviament descrit per explorar en una prova pilot les primeres 180 mostres de plasma. Degut als resultats positius de l'experiment es procedirà a aplicar-lo a la totalitat de l'estudi Food4Brain.

El material comprat permet a la Universitat de Barcelona procedir amb la fase experimental, analitzant les mostres per espectrometria de masses, QTRAP als laboratoris de la UB-CCiT, adaptat a volums molt reduïts de mostra biològica.

El fungible Mega-TMIC està vinculat EXCLUSIVAMENT als programaris d'anàlisi de treball específics desenvolupats per l'equip del Professor David Wishart, de la Universitat d'Alberta: CFM-ID 4.0 (https://cfmid.wishartlab.com) i les bases de dades associades ChemFOnt (https://www.chemfont.ca/) i https://hmdb.ca/.

2. Especificacions tècniques requerides.

Cada assaig necessita el següent:

Item	Description	Notes
Plate set	A 96-well plate with filter plate	Centrifuge the plate before use
Pre-slit silicon mats	2 mats	For injection after preparation
Tubes for derivatization solution	2 tubes	For PITC solution
DFI buffer A	2 vials	For DFI dilution and running
96-deep-well collection plates	4 plates	For LC-MS/MS analyses
Calibration standards	3 vials	For LC-MS/MS
Labeled-ISTD mixture	3 vials	One for DFI-MS/MS and two for LC-MS/MS
QCs	2 vials	For LC-MS/MS
DFI standard	1 vial	For DFI-MS/MS
Reagent 1	1 vial	For LC-MS/MS
Reagent 2	1 vial	For LC-MS/MS
Reagent 3	1 vial	For LC-MS/MS, empty vial
Reagent 4	1 vial	For LC-MS/MS, empty vial

Related Documents	11 files	Acquisition and quantification methods, user manual, calibration standards & QC concentration details and corresponding preparation guide, and method parameters
Web Server	CFM-ID 4.0 web server https://cfmid.wishartlab.com	The Mega Assay is exclusively linked to the CFM-ID 4.0 web server is an online tool for predicting, annotating and interpreting tandem mass (MS/MS) spectra of small molecules
Database	Human Metabolome Database (HMDB) https://hmdb.ca/	Database containing detailed information about small molecule metabolites found in the human body: 1) chemical data, 2) clinical data, and 3) molecular biology/biochemistry data. The database contains 220,945 metabolite entries including both water-soluble and lipid soluble metabolites. Additionally, 8,610 protein sequences (enzymes and transporters) are linked to these metabolite entries.
Ontology	Chemical Functional Ontology (ChemFOnt) https://www.chemfont.ca/	Hierarchical, OWL-compatible ontology describing the functions and actions of more than 341,000 biologically important chemicals, including primary metabolites, secondary metabolites, natural products, food chemicals, synthetic food additives, drugs, herbicides, pesticides and environmental chemicals.

3. Garantia.

Garantia: La qualitat del producte queda comprovada i confirmada a l'origen, prèviament a l'enviament.
Amb el kit es proporcionarà un certificat de qualitat/dades de qualitat.
TMIC no es fa responsable de cap dany durant l'enviament.