

PLEC DE PRESCRIPCIONS TÈCNiques DE LA CONTRACTACIÓ DE L'ADQUISICIÓ D'UN ESPECTRÒMETRE DE MASSES ESI-Q/TOF ACOBLAT A UN CROMATÒGRAF LÍQUID HPLC (ESITOF) - Exp. UdG-2023-0027

De caire general:

L'equip s'oferirà com un sistema absolutament funcional complet, incloent transport, instal·lació i la formació necessària per al seu maneig. Ha d'incloure la possibilitat de diagnòstic i control remot de l'instrument via xarxa.

Es durà a terme la verificació d'especificacions, correcte funcionament i generació de dades per tots els mòduls de l'equip. Es lliurarà documentació acreditativa.

Documentació:

Juntament amb l'equip s'hauran de lliurar, en suport digital, els manuals complets d'instruccions de maneig, de manteniment preventiu i d'especificacions tècniques d'instal·lació, així com els manuals del programari informàtic que es subministri.

Addicionalment es proporcionarà, en suport paper, els manuals d'instruccions de maneig i de manteniment preventiu de l'equip.

Descripcions tècniques:

Tota la instrumentació i consumibles vinculats han d'estar subministrats pel mateix fabricant. Aquest instrument va dotat obligatòriament de les següents parts:

1.- Espectròmetre de masses d'alta resolució quadrupol-temps de vol amb font electroesprai (ESI-Q/TOF) amb les següents característiques:

- Capacitat de mesura en polaritat positiva i negativa.
- Resolució de masses superior a 30.000 FWHM mesurada al voltant de 1200 m/z, a velocitat estàndard de HPLC/UHPLC i màxima sensibilitat.
- Capacitat d'adquisició d'espectres de masses tipus MS i MS/MS.
- Sistema TOF amb reflector de pas únic (single stage reflector) per a màxima sensibilitat i màxima resolució a velocitat d'adquisició espectral de fins a 50 espectres per segon en mode MS i MS/MS.
- Rang de masses de l'analitzador de temps de vol d'almenys entre 20 i 20.000 m/z. Especial sensibilitat en masses baixes que permeti l'anàlisi d'ions MS i MS/MS de baix pes molecular.

- Exactitud de massa millor que 1 ppm en MS i MS/MS.
- El quadrupol ha de permetre la selecció d'ions precursors de com a mínim fins a 3.000 m/z. Si no hi ha preselecció, el quadrupol ha de permetre la transmissió d'ions fins com a mínim 20.000 m/z.
- Rang dinàmic lineal superior a 5 ordres de magnitud amb digitalitzadora de 10bits.
- Alta sensibilitat per detectar almenys 1 picogram de reserpina a màxima resolució, amb una ràtio RMS >100:1 en mode MS.
- Extracció de cromatogrames d'alta resolució millor de ± 1.5 mDa amb total estabilitat durant tot el pic cromatogràfic.
- L'equip ha de ser compatible amb la font de ionització Cryospray que hi ha actualment al laboratori de masses dels Serveis Tècnics de Recerca de la UdG.
- L'equip disposa d'una font d'Electrosprai (ESI) amb òptica d'ions de doble embut (dual ion funnel) per la màxima transmissió d'ions i focalització.
- Agulla de nebulitzador amb connexió a terra per màxima seguretat.
- En condicions estàndard s'obté el perfil isotòpic real amb màxima fidelitat, per poder ser comparat amb el perfil teòric com a paràmetre d'identificació de compostos coneguts i desconeguts.
- Calibratge:
 - El sistema no requereix el calibratge de massa exacta de manera continua operant de forma estàndard sense calibrant. El calibratge de massa es realitzarà típicament al principi o al final del cromatograma.
 - S'ha de poder treballar en MS i MS/MS amb un únic calibratge.
 - El calibrant ha de poder ser escollit i dissenyat per l'usuari, amb l'opció de recalibrar els espectres de masses després de la seva adquisició i contemplar múltiples opcions: calibratge lineal, quadràtic...
- Sistema que permeti el subministrament de calibrant de forma ininterrompuda.
- Total compatibilitat amb els sistemes HPLC més habituals del mercat, dissenyat especialment per la seva integració amb el sistema HPLC inclòs.
- L'instrument ha d'incloure el/s sistema/es de buit necessari/s per garantir les seves necessitats.

2.- Cromatògraf líquid (HPLC):

- Sistema HPLC complet per treballar en LC/MS.

- Bomba binària amb doble pistó per canal o quaternària que permeti seleccionar entre quatre dissolvents.
- Bomba capaç d'assolir un rang de flux variable (des de 0.001 fins a 2 mL/min lliure de polsos), amb un baix volum mort (inferior a 350 µL) i capacitat de treballar a pressió d'almenys 800 bar en tot el rang de flux. La bomba ha de disposar de purga automàtica.
- Desgasador integrat de com a mínim dos canals.
- Injector automàtic amb safata per a vials termostatzada que permeti refredar fins a 4°C, amb capacitat d'almenys 100 vials de 2 mL i possibilitat d'injectar un volum variable d'entre almenys 1 i 100 µL de forma precisa.
- Termòstat de columnes d'alta capacitat per almenys quatre columnes. Rang operatiu d'almenys 10°C per sota temperatura ambient fins a 85 °C en intervals de màxim 1°C.
- Mínim efecte memòria <0.05% std, <0.01% amb rentat.
- Detector UV, de longitud d'ona variable integrat en el software.

3.- Sistema informàtic:

- Ordinador d'última generació amb processador de com a mínim 3.6GHz, amb almenys 16 GB de RAM i almenys 2 TB de disc dur, que inclogui tot el programari i maquinari necessaris per al control de tots els paràmetres i funcions de l'instrument, i el post processament i permeti alhora la connexió a internet. R/W DVD-ROM i targeta Ethernet d'almenys 10/100Mb.
- Monitor pla de 24 polzades o més.
- Possibilitat d'exportació de les dades a múltiples formats.
- Software complet d'adquisició i control de l'instrument que inclogui eines per a l'adquisició de dades, tractament de dades, generació de perfil isotòpic i massa exacta.
- El software de control de l'aparell ha de permetre la modificació i optimització dels paràmetres de ionització i transmissió.
- S'inclouran un mínim de tres llicències del software de tractament de dades.
- El software de control de l'aparell ha de permetre fer una sintonització automàtica per part de l'usuari (sense intervenció del servei tècnic).

- Software d'identificació automàtica de fórmules moleculars per a compostos desconeguts integrant dades de massa exacta, perfil isotòpic i fragments MS/MS. Assignació més probable de formula molecular i estructura química amb editor gràfic.
- Kit complet d'aplicació per a l'escombrat, identificació i confirmació d'anàlits en un sol mètode.
- Biblioteca amb dades de temps de retenció, massa exacta, perfil isotòpic i fragments MS/MS de compostos d'interès toxicològic i seguretat alimentària.
- Codificació visual i intuïtiva (per colors) per al compliment de tots els paràmetres d'identificació.
- Programari d'integració amb eines de quantificació i validació de resultats.
- Kit de columnes, fungibles i patrons per a la posada a punt.
- Programari Client/Servidor per a la quantificació d'anàlits, i el compliment de criteris de qualitat. Ha de permetre la comparació amb biblioteques d'escombrat ràpid (Screening) d'un gran rang de compostos sense necessitat de patrons. Ha de permetre l'anàlisi retrospectiva de mostres. Ha de permetre la connexió simultània de com a mínim tres usuaris alhora.
- Software per facilitar còpia de seguretat de mètodes i dades.

4.- Formació específica pel funcionament de l'instrument:

- Un cop instal·lat l'aparell, es durà a terme una primera de formació per part de l'enginyer que faci la instal·lació.
- En una segona etapa es durà a terme una formació avançada en l'ús del software i en el maneig i manteniment de l'equip al laboratori d'instal·lació: ampliació de la formació que hauria de consistir en que, una vegada que els responsables de l'equip i els usuaris s'hagin familiaritzat amb l'aparell, un tècnic formador proporcioni una capacitat addicional en aplicacions i que s'haurà de dur a terme dins del primer any de la instal·lació i posada en marxa de l'equip.

5.- Servei tècnic:

- L'adjudicatari ha de disposar d'un servei tècnic amb personal tècnic qualificat en la tecnologia HPLC-ESI-QTOF i capacitat de ràpida resposta a incidències de tots els mòduls de l'equip.
- L'empresa adjudicatària ha de disposar de tècnics especialistes en aplicacions HPLC-ESI-QTOF en territori nacional.

6.- Garantia:

- La garantia de l'equip ha de ser de 2 anys a partir de la data de posada en funcionament de l'equip. L'equip es considerarà instal·lat i en funcionament un cop efectuada la comprovació del correcte funcionament de l'equip amb mostres de rutina en algun dels mètodes adaptats. La garantia ha de cobrir:
 - Totes les peces.
 - Fungibles emprats en les reparacions i manteniments preventius.
 - Desplaçaments il·limitats.
 - Mà d'obra.
 - Suport telefònic de maquinari.
 - Suport telefònic de programari.
 - Actualització de revisions de programari durant el període de garantia, compatibles amb el hardware existent.
 - Un manteniment preventiu abans de finalitzar la garantia.