

**EXP. CRG 01/24**

**PLIEGO DE PRESCRIPCIONES TÉCNICAS**

**SUMINISTRO E INSTALACIÓN DE UNA PLATAFORMA COMPUESTA POR DOS SISTEMAS DE CROMATOGRAFÍA LÍQUIDA ACOPLADA A ESPECTROMETRÍA DE MASAS, Y LOS RECURSOS INFORMÁTICOS ASOCIADOS, PARA EL CENTRO DE REGULACIÓN GENÓMICA (CRG)**

Debido a la interdependencia de las distintas partes e instrumentos, y la necesidad de operar de manera sinérgica se licita una plataforma integrada. Se pretende así mantener la cohesión y homogeneidad en los resultados y evitar comprometer la eficacia global, mediante incongruencias metodológicas, redundancias o incompatibilidades. La integración coordinada en una única plataforma debe garantizar la funcionalidad óptima y la eficiencia del sistema, para alcanzar los resultados deseados. El presente Pliego de prescripciones técnicas establece las características que deben cumplir los equipos científicos que conforman esta plataforma y que son objeto del expediente de contratación.

**Ficha Técnica:**

La plataforma licitada debe incluir dos equipos de espectrometría de masas, dos sistemas de cromatografía líquida, y los recursos informáticos y formativos asociados, con los siguientes requerimientos técnicos:

El primer equipo de espectrometría de masas debe cumplir las siguientes prescripciones técnicas:

- Disponer de la combinación de los siguientes tres analizadores de masa: cuadrupolo, trampa iónica orbital, y un tercer analizador de alta resolución cuyo principio de funcionamiento esté basado en el tiempo de vuelo, además de una celda de colisión.
- Cada analizador de masas debe poder trabajar secuencialmente con los demás, o en paralelo con los demás.
- Tener un rango de masas mínimo de 40 a 6.000 m/z.
- Disponer de una resolución mínima del analizador de alta resolución de trampa iónica orbital de 480.000 FWHM a m/z 200.

- Disponer de una exactitud de masa del analizador de alta resolución de trampa iónica orbital menor de 3 ppm con calibración externa y menor de 1 ppm con calibración interna.
- Disponer de una resolución mínima del analizador de alta resolución basado en tiempo de vuelo de 80.000 FWHM a m/z 524.
- Disponer de un analizador tipo cuadrupolo con anchura programable de la ventana de selección de ion precursor de hasta 0.4 Da FWHM.
- Disponer de una celda de colisión para fragmentación de iones en modo tándem.
- Operar sin necesidad de refrigeración criogénica y/o por gases licuados.
- Tener la capacidad de ejecutar análisis de espectrometría de masas por barrido y de monitorización en modo ion precursor (MS1) y fragmentos (MS2).
- Disponer de modos avanzados de adquisición de datos, incluyendo como mínimo: 1) lista de exclusión dinámica de iones precursores para fragmentar y lista de inclusión preferente de iones precursores; 2) modo de barrido para la cuantificación automática y coordinada de compuestos marcados mediante etiquetas isobáricas con alta resolución para realizar experimentos de cuantificación multiplexada; 3) métodos de adquisición en modo dirigido (MS1, MS2), métodos de adquisición en modo dinámico dependiente de datos (DDA), y métodos de adquisición en modo independiente de datos (DIA); 4) capacidad para excluir temporalmente un ion precursor, en adquisición MS/MS, para incrementar la selectividad de compuestos que coeluyen y aumentar la señal del compuesto seleccionado; 5) capacidad para generar automáticamente espectros MS/MS al detectar un patrón isotópico previamente definido y cuando se produce una diferencia o una pérdida de masa previamente definidas entre dos señales; y 6) capacidad para compensar de forma automática la energía necesaria de fragmentación, dependiendo de la masa del ion a fragmentar y mejorar la reproducibilidad de un instrumento a otro.
- Disponer de una fuente de ionización que permita la conexión “plug-and-play” de columnas termo-estabilizadas para nanoflujos con control de temperatura en un rango mínimo entre 35 y 50 °C.
- Disponer de un dispositivo de filtro molecular por movilidad iónica.
- Disponer de un programario de control del equipo de espectrometría de masas compatible con el control integrado del sistema de cromatografía líquida, capaz de controlar el equipo, realizar la calibración del sistema, los tests diagnósticos y la adquisición de datos.

- Disponer de un programario de creación de métodos de adquisición, y del programario de interpretación de espectros y datos para aplicaciones de proteómica (identificación y cuantificación de péptidos y proteínas).
- Disponer de un sistema de reducción del ruido para la insonorización de las bombas de vacío rotatorias.
- Incluir un mínimo de un año de garantía y mantenimiento preventivo para el espectrómetro de masas, con un tiempo de respuesta máximo de 1 semana desde la comunicación de la incidencia.

El segundo equipo de espectrometría de masas que forma parte de la plataforma licitada debe cumplir las siguientes prescripciones técnicas:

- Disponer de la combinación de los siguientes dos analizadores de masa: un primer analizador de tipo cuadrupolo, y un segundo analizador de alta resolución de tipo trampa iónica orbital, además de una celda de colisión.
- Disponer de un rango de masas mínimo de 40 a 8.000 m/z.
- Disponer de una resolución mínima en el analizador de alta resolución de trampa iónica orbital de 240.000 FWHM a m/z 200.
- Disponer de una exactitud de masa menor de 3 ppm con calibración externa y menor que 1 ppm con calibración interna en el analizador de alta resolución de trampa iónica orbital.
- Disponer de un analizador tipo cuadrupolo con anchura programable de la ventana de selección de ion precursor de hasta 0.4 Da FWHM.
- Disponer de una celda de colisión para fragmentación de iones en modo tándem.
- Operar sin necesidad de refrigeración criogénica y/o por gases licuados.
- Tener la capacidad de ejecutar análisis de espectrometría de masas por barrido y de monitorización en modo ion precursor (MS1) y fragmentos (MS2).
- Disponer de modos avanzados de adquisición de datos, incluyendo como mínimo: 1) lista de exclusión dinámica de iones precursores para fragmentar y lista de inclusión preferente de iones precursores; 2) modo de barrido para la cuantificación automática y coordinada de compuestos marcados mediante etiquetas isobáricas con alta resolución para realizar experimentos de cuantificación multiplexada; 3) métodos de adquisición en modo dirigido en MS1 y MS2, métodos de adquisición en modo dinámico dependiente de datos (DDA), y métodos de adquisición en modo independiente de datos (DIA); 4) capacidad

para excluir temporalmente un ion precursor, en adquisición MS/MS, para incrementar la selectividad de compuestos que coeluyen y aumentar la señal del compuesto seleccionado; 5) Capacidad para generar automáticamente espectros MS/MS al detectar un patrón isotópico previamente definido y cuando se produce una diferencia o una pérdida de masa previamente definidas entre dos señales; y 6) Capacidad para compensar de forma automática la energía necesaria de fragmentación, dependiendo de la masa del ion a fragmentar y mejorar la reproducibilidad de un instrumento a otro.

- Disponer de una fuente de ionización que permita la conexión “plug-and-play” de columnas termo-estabilizadas para nanoflujos con control de temperatura en un rango entre 30 y 55 °C.
- Incluir un dispositivo de filtro por movilidad iónica
- Disponer de un programario de control del equipo de espectrometría compatible con el control integrado del sistema de cromatografía líquida, capaz de controlar el equipo, realizar la calibración del sistema, tests, diagnósticos y la adquisición de datos.
- Disponer de un programario de creación de métodos de adquisición, y del programario de interpretación de espectros y datos para aplicaciones de proteómica (identificación y cuantificación de péptidos y proteínas).
- Disponer de una mesa técnica para albergar e instalar el espectrómetro de masas, con sistema de reducción del ruido y plataforma deslizante para las bombas de vacío rotatorias, colector de calor, y soporte para ordenador, monitor y teclado.
- Incluir un mínimo de un año de garantía y mantenimiento preventivo para el espectrómetro de masas descrito anteriormente, con un tiempo de respuesta máximo de 1 semana desde la comunicación de la incidencia.

La plataforma debe incluir dos equipos de cromatografía líquida con los siguientes requerimientos técnicos:

- Disponer de una bomba binaria con presión de trabajo de 1500 bar.
- Ser capaces de operar indistintamente y sin cambios en el hardware en el rango de flujos como mínimo desde 100 nanolitros/minuto hasta 100 microlitros/minuto.
- Ser capaces de operar como mínimo en rango de pH entre 2 y 10.
- Tener una reproducibilidad de tiempo de retención inferior a 0,2 % RSD o inferior a 0.1 SD min para el péptido TGQAPGFSYTDANK a los flujos

recomendados de operación.

- Garantizar una contaminación cruzada entre muestras inferior al 0,1 % con el péptido TGQAPGFSYTDANK en las condiciones operativas de la instalación.
- Incluir un muestreador automático refrigerado (compatible con mínimo con viales de 2, 4 y 10 mL, así como placas de pocillos de 96 y 384 pocillos) y compartimento termostatzado de columnas.
- Tener una reproducibilidad de inyección inferior a 0,25 % a 2 µL e inferior 50 % a 50 nL, entendido como desviación estándar relativa (RSD).
- Tener un programario de control que esté integrado con el programario de control del espectrómetro de masas.
- Disponer de una mesa técnica con altura regulable para albergar el sistema de cromatografía líquida.
- Incluir un mínimo de un año de garantía y mantenimiento preventivo para cada equipo de cromatografía líquida, con un tiempo de respuesta máximo de 1 semana desde la comunicación de la incidencia.

Finalmente, los recursos informáticos y formación asociados deberán cumplir con los siguientes requerimientos técnicos:

- Dos ordenadores para el control y adquisición de datos asociados a cada espectrómetro de masas y su respectivo cromatógrafo, con monitor de al menos 27".
- Un ordenador de altas prestaciones para procesamiento de datos proteómicos, con un procesador con un mínimo de 8 cores, con 32GB de RAM, disco SSD y 4TB HDD, incluyendo un monitor de al menos 27".
- Adicionalmente se deberá suministrar un servidor con la arquitectura adecuada para el procesamiento inteligente y almacenamiento de los datos proteómicos adquiridos.
- Programario para el control de los equipos de espectrometría de masas y cromatografía líquida, la calibración del sistema, diagnósticos y adquisición de datos instalado en cada uno de los ordenadores suministrados.
- Una licencia de programario para análisis en entorno biofarmacéutico, con funciones para análisis de proteína intacta, mapeado de péptidos, análisis de oligonucleótidos y análisis top-down.
- Tres licencias de programario de análisis de datos para proteómica, que incluyan motor de búsqueda para la identificación y diferentes modos de

cuantificación incluyendo el modo DIA, en modo de nuevas licencias o actualizaciones de licencias existentes.

- Formación técnico-aplicativa de un mínimo de 2 sesiones de 2 días de duración cada una, para un mínimo de 10 personas cada una.

El objeto del presente contrato está cofinanciado, por una parte, con la financiación parte de la ayuda ICT2021-006736 financiada por el “*Ministerio de Ciencia e Innovación (MCIN)*” y por la “*Unión Europea Next Generation EU: Plan de Recuperación de la UE /Plan de Recuperación, Transformación y Resiliencia de España (PRTR)*” y, por otra parte, con los fondos internos del centro provenientes de la Generalitat de Cataluña.

Barcelona, a 11 de març de 2024.

Órgano de Contratación