



Expedient nº: AG-2024-1373

Prescripcions tècniques per a la contractació del subministrament i instal·lació d'un equip de cromatografia líquida amb detector d'espectrometria de masses triple quadrupol híbrid amb trampa d'ions pel Laboratori Agroalimentari

1. Objecte del contracte

L'objecte del contracte és el subministrament i instal·lació d'un cromatògraf líquid amb detector d'espectrometria de masses triple quadrupol híbrid amb trampa d'ions al Laboratori Agroalimentari.

2. Components del subministrament

L'equip que es pretén adquirir haurà de tenir els següents components i prestacions:

- 1 sistema de cromatografia líquida d'ultra alta pressió
- 1 detector d'espectrometria de masses triple quadrupol híbrid amb trampa d'ions
- 1 sistema informàtic de processament de dades
- 1 programari de control de l'instrument
- 1 sistema de generació de Nitrogen i aire (generador + compressor)
- Instal·lació
- Posada a punt d'aplicacions analítiques
- Formació

3. Característiques tècniques del subministrament

3.1. Sistema de cromatografia líquida d'ultra alta pressió sèrie ACQUITY UPLC I-Class (SM-FL)

3.1.1. Bomba (Binary solvent manager)

- Amb desgasificador per buit integrat pels eluents i solvents de rentat entre mostres de l'injector automàtic.
- Amb possibilitat de bombejar cada eluent a la pressió de treball per una de les dues bombes independents que permeten barrejar dos eluents seleccionats dels dos parells possibles (A1 o A2 amb B1 o B2).
- Amb pistons en sèrie amb motors independents
- Amb vàlvules d'entrada amb control electrònic
- Amb exactitud de cabdal de $\pm 1\%$ a 0.5 mL/min
- Amb exactitud de composició de gradient de $\pm 0.5\%$ de 5% a 95% (entre 0.2 i 2 mL/min)
- Precisió de composició de gradient $< 0.2\%$ RSD (entre 0.2 i 2 mL/min).
- Amb possibilitat de programar fins 11 corbes de gradient
- Amb sistema de rentat d'èmbols de les bombes per tal d'evitar el dipòsit de sals



3.1.2. Injector automàtic (Sample manager-FL)

- Amb control de temperatura del compartiment de mostres entre 4-40°C per sistema Peltier
- Amb loop de 5 µL.
- Volum d'injecció d 0.1 a 250 µL en increments de 0.1 µL garantint precisió $\leq 0.5\%$ RSD (de 2-10 µL) i linealitat >0.999
- Sistema integrat programable pel rentat d'agulla d'injecció i purga dels sistema.
- Amb possibilitat d'injectar 2 plaques de 48 vials de 2 mL

3.1.3. Forn de columna

- Amb forn o compartiments per columnes, amb possibilitat de posar dues columnes
- Amb control de temperatura entre 4°C i 90°C en increment de 0.1°C.

3.2. Espectròmetre de masses triple quadrupol híbrid amb trampa MS/MS/MS model SCIEX QTRAP7500+ de tecnologia de triple quadrupol i trampa iònica lineal, amb modus d'escaneig independents i de forma híbrida (patentat) amb font de ionització Electrospray.

3.2.1. Analitzador:

- Amb sistema híbrid triple quadrupol-trampa ions lineal, amb dos analitzadors quadrupolars (Q1 i Q3) essent Q3 trampa d'ions lineal amb acceleració axial Lineal Accelerator™ Trap que permet treballar amb modus triple quadrupol i trampa d'ions o combinat quadrupol-trampa lineal.
- Els dos analitzadors (Q1 y Q3) han d'estar separats per una cel.la de col·lisió quadrupolar (Q2) Q2, Qurved™ LINAC Collision Cell.
- Amb sistema d'introducció de la mostra articulada, amb capacitat de moviment en els eixos x,y,z permetent variar l'angle de nebulització. La interfície de buit es basa en la "cortina de gas" (Curtain gas US patent, amb nitrogen que permet mantenir l'analitzador net amb capacitat d'operació en ions positius i negatius).

3.2.2. Font de ionització:

- Ha de poder treballar amb sonda ESI en modus positiu i negatiu des de temperatura ambient fins a 750°C.
- Amb possibilitat de treballar amb flux de 5 µL/min fins 3000 µL/min sense divisió de flux.
- La sonda ESI han de poder ser extreta per al seu manteniment en menys de 2 minuts sense l'ús d'eines, i ha de ésser reconeguda i configurada automàticament per l'instrument quan s'instal·la en la font de ionització.
- Ha de ser compatible amb rang de flux d'1µL/min a 3mL/min i amb dissolvents al 100% aquosos fins 100% orgànic amb fins un 1% d'àcid o base.

3.2.3. Tipus d'Scan:

- Full Scan MS pels quadrupols Q1 i Q3
- Select Ion Monitoring pels quadrupols Q1 i Q3



- Product Ion Scan
- Precursor Ion Scan
- Neutral Loss o Gain Scan
- Multiple Reaction Monitoring (MRM)
- Enhanced MS Scan
- Enhanced Product Ion Scan
- Enhanced Resolution Scan
- MS³ Scan
- MRM³ Scan
- Amb possibilitat d'encadenar les formes "product ion scan", "precursor ion scan", "neutral loss" o pèrdua de molècules neutres, de forma verdadera, no mitjançant ajustaments de programari, combinar RF/DC i "Enhanced MS", combinar "Enhanced MS/MS" i MS/MS/MS per mitjar del programa Information Dependant Acquisition (IDA) per tal d'assolir informació de MW i informació estructural en una sola injecció. Forma d'scaneig ("Time Delayed Fragmentation Ion Scan") que redueix la quantitat d'ions secundaris en MS/MS i MRM3 per incrementar l'especificitat.

3.2.4. Sistema de buit turbomolecular:

- Amb sistema de seguretat i protecció front a talls de potència i/o buit.
- Amb refrigeració de les bombes per aire.

3.2.5. Especificacions tècniques

- Rang dinàmic lineal: 6 ordres de magnitud
- Rang de masses en Triple Quad (m/z): 5-2000 Da.
- Rang de masses ion trap lineal: 50-2000 Da.
- Mínim MRM dwell time: 1 mil·lisegon.
- Estabilitat de massa: 0.1 Da en 24 hores
- Sensibilitat en MRM modus positiu (sonda ESI): La injecció d'1 pg de reserpina en columna ha de proporcionar una s/n > 5.000.000:1 per a la transició 609/195.
- Reproductibilitat en modus positiu (sonda ESI): ha de tenir, per la transició 609/195 fent 10 replicats d'injecció de 0.5 fg de reserpina en columna, una STD en % del àrea inferior al 10%.
- Sensibilitat en MRM modus negatiu (sonda ESI): La injecció d'1 pg de cloranfenicol en columna ha de proporcionar una s/n > 5.000.000:1 per a la transició 321/152.
- Sensibilitat en MRM³: la injecció de 10 fg en columna de reserpina monitoritzant 609.3/397/365 ha de tenir una relació senyal soroll s/n > 30.
- Reproductibilitat en modus negatiu (sonda ESI): ha de tenir, per la transició 609/195 fent 10 replicats d'injecció de 0.5 fg de reserpina en columna, una STD en % del àrea inferior al 10%.
- QTRAP: sensibilitat amb sonda ESI en modus Enhanced Product Ion mode (EPI product de 609.3) injectant en columna 10 fg de reserpina, l'instrument ha de tenir una S/N > 200:1, on el soroll es defineix com l'STD de la línia de base.
- Velocitat suficient d'escaneig per poder fer 800 MRM/segon amb un dwell time mínim de 0,6 mil·lisegons i canvi de polaritats de 5 mil·lisegons per a poder treballar amb mostres complexes.



3.3. Sistema informàtic:

- 2 Ordinadors amb processador d'última generació un d'ells per treballar en remot
- 16 GB de RAM
- Emmagatzematge intern de 2Tb
- Dos monitors de com a mínim 23 polsades i d'ells per connectar amb l'ordinador que treballi en remot
- Amb paquet Office

3.4. Programari de control de l'instrument

- Amb llicència perpetua de programari d'adquisició i processament de dades, amb actualitzacions gratuïtes en el període de garantia de l'equip.
- Compatible amb Windows 10.
- Ha de proporcionar una eina que permeti ajustar el temps de retenció d'adquisició de les transicions MRM de manera que només els ions que elueixin en un temps de finestra especificat siguin monitoritzats. El procés de crear el mètode d'adquisició ha d'acceptar una llista de noms de compostos, transicions MRM i tr esperat que utilitza per programar els scans MRM en l'experiment.
- Ha de disposar de e-signatura i "audit trail"
- Ha de poder realitzar anàlisis en temps real i accions correctives mentre s'adquireixen les mostres.
- Ha de disposar d'una eina d'interpretació de la fragmentació.
- Ha de proveir d'un sistema automàtic de càlcul, processament de dades i creació d'informes.
- Amb catàleg de compostos disponibles (plaguicides, antibiòtics, micotoxines, residus veterinaris i altres compostos emergents)
- La informació generada ha de ser fàcilment transferible als processadors de textos, fulls de càlcul com Word, PDF i Excel.

3.5. Sistema de generació de nitrogen, compressor de aire i caixa d'insonorització per a bombes rotatòries externes.

- Que estigui dissenyat per complir els requeriments específics del subministrament de gas del detector QTRAP7500+.
- Amb compressor d'aire integrat.

4. Instal·lació

Tots els components inclosos en aquest subministrament s'han d'instal·lar en el servei al Laboratori Agroalimentari.

4.1. Sistema cromatogràfic i detector

Instal·lació completa de l'equip al laboratori fins assolir especificacions tècniques.

L'equip s'instal·larà en la planta 3 de l'edifici, l'adjudicatari haurà de proporcionar els mitjans necessaris per ubicar l'equipament en l'esmentada planta.

El licitador ha d'incloure en la seva oferta les proves de rendiment a realitzar per verificar el compliment de les especificacions tècniques i els criteris d'acceptació establerts pel fabricant.

4.2. Compressor i generador de N2

La instal·lació del compressor i generador es farà en la planta 3 de l'edifici l'adjudicatari haurà de proporcionar els mitjans necessaris per ubicar l'equipament en l'esmentada planta. La reinstal·lació corresponent no està inclosa en aquesta licitació. Si correspon a l'adjudicatari l'adequació de la mateixa per donar servei a l'equip cromatogràfic.



L'adjudicatari haurà de retirar tot l'embalatge que porti el subministrament.

5. Posada a punt d'aplicacions analítiques

Determinació de multiresidus de plaguicides en carbassó:

L'equip ha de poder assolir el límits de quantificació de 0,003 mg/Kg per cadascun dels analits següents:

Acequinocyl	Dimethoate	Imazalil	Propizamide	Thiabendazole
Acetamiprid	Dimethomorph	Imidacloprid	Pymetrozine	Thiacloprid
Aldicarb	Diniconazole	Indoxacarb	Pyraclostrobin	Thiamethoxam
Aldicarb-sulfone	Dodine	Iprovalicarb	Pyraflufen Ethyl	Thiodicarb
Aldicarb-sulfoxide	Etoxazole	Isopyrazam	Pyrethrin I	TPP
Azoxystrobin	Famoxadone	Jasmolin I	Pyrethrin I	Tolyfluanide
Bitertanol	Fenamidone	Jasmolin II	Pyrethrin II	Triadimefon
Boscalid	Fenbuconazole	Linuron	Pyridaben	Triadimenol
Bupyrimate	Fenhexamid	Lufenuron	Pyrimethanil	Trifloxystrobin
Carbaryl	Fenoxycarb	Malaoxon	Pyriproxyfen	
Chlorantraniliprole	Fenpropathrin	Malathion	Quinoxifen	
Chlorpropham	Fenpropimorph	Metalaxyl	Quizalofop P ethyl	
Cinerin I	Fenpyrazamine	Methomyl	Simazine	
Cinerin II	Fenpyroximate	Methoxyfenozide	Spinetoram	
Clofentezine	Fentin Oxide	Milbemycin A3	Spinetoram	
Clothianidin	Fenthion-sulfone	Milbemycin A4	Spinosyn A	
Cymoxanil	Fenthion-sulfoxide	Monocrotophos	Spinosyn D	
Cyproconazole	Flonicamid	Omethoate	Spirodiclofen	
Cyprodinil	Flufenoxuron	Oxadiazon	Spirotetramat	
Demeton-S-methyl sulfone	Fluopyram	Oxadixyl	Spiroxamine	
Diethofencarb	Flupyradifurone	Paclobutrazol	Sulfoxaflor	
Difenoconazol	Flusilazol	Paraoxon-methyl	Tebuconazole	
Diflubenzuron	Flutriafol	Pencycuron	Tebufenozide	
Diflufenican	Fluxapyroxad	Pendimethalin	Terbutylazine	
Dimethenamide	Hexythiazox	Propargite	Tetraconazole	

Determinació de glifosat per MS³ en carbassó:

L'equip ha de poder assolir el límit de quantificació de 0,003 mg/Kg per l'analit Glifosat.

Es farà el traspàs, amb l'optimització corresponent, dels mètodes de residus de plaguicides, que tinguin en l'abast d'acreditació del Laboratori Agroalimentari a data d'instal·lació de l'equip, de la resta de línies de LC-MS/MS en servei en el laboratori.



6. Formació

El subministrament inclourà formació avançada de 4 dies en LC-MS/MS i posada a punt de les aplicacions després de la instal·lació. La formació serà presencial en les instal·lacions del Laboratori Agroalimentari.

Servei de consultoria entre els mesos 6 i 12 després de la instal·lació amb la finalitat d'optimitzar els mètodes implementats fins la data, així com el disseny de la posada a punt de noves aplicacions segons necessitats.

7. Garantia

La garantia de l'equip ha de ser de dos anys a partir de la data de posada en funcionament de l'equip i ha de cobrir:

- Peces.
- Desplaçaments.
- Mà d'obra.
- Suport telefònic de maquinari.
- Suport telefònic de programari.

8. Lloc de lliurament de l'equip

Els components hauran de ser lliurats a les dependències del servei de Laboratori Agroalimentari, ubicat al c/ Camí de Mataró, nº 1, 08348, de Cabriels.

9. Termini de lliurament

Dos mesos des de la formalització del contracte

10. Posada en funcionament

L'equip es considerarà instal·lat i posat en funcionament un cop efectuada la comprovació del correcte funcionament de l'equip amb mostres de rutina en algun dels mètodes adaptats.

Joan Gòdia i Tresàncez
Director General d'Empreses Agroalimentàries, Qualitat i Gastronomia