



## **Prescripcions tècniques per a la contractació del subministrament i instal·lació d'un equip de cromatografia de gasos amb detector d'espectrometria de masses triple quadrupol (GC-MS/MS) pel Laboratori Agroalimentari**

---

### **1. Aspectes previs**

El Laboratori inclou actualment en el seu abast d'acreditació uns 170 plaguicides, i té com a objectiu incorporar el programa d'acreditació "Assaig pel control de la producció ecològica", per tal de poder donar suport al control d'aquest sistema de producció, que té una demanada creixent per part dels consumidors i promou la producció agrària sostenible. Aquesta fita implica incrementar aproximadament un 50% el nombre de plaguicides de l'abast i disminuir els límits de quantificació dels mètodes actualment en servei.

Per tal de complir amb els requeriments del control oficial de la producció, incloent l'ecològica, el laboratori necessita disposar d'equipament més sensible del que disposa hores d'ara.

És necessari instal·lar una línia de GC-MSMS nova per tal de poder assolir els requeriments de sensibilitat de producció agrària ecològica. Amb aquest canvi, el laboratori disposarà de l'actualització de la línia 1528 i d'una línia GC-MSMS totalment nova aprofitant l'injector automàtic de la 1933.

L'únic equip al mercat que incorpora les característiques anteriors és el format pel cromatògraf de gasos model 8890 i el detector de masses 7010D amb el programari Mass Hunter 13 d'Agilent Technologies.

Agilent Technologies Spain, S.L. és la companya del grup Agilent que té l'exclusiva en Espanya per a la distribució i comercialització de tots els productes Agilent i, en particular la línia formada pel cromatògraf de gasos model 8890 i el detector de masses 7010D amb el programari Mass Hunter 13 d'Agilent Technologies.

### **2. Objecte del contracte**

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

### **3. Components del subministrament**

La nova línia de GC-MS/MS ha d'incorporar els següents components:

- 1 sistema de cromatografia de gasos
- 1 detector d'espectrometria de masses triple quadrupol
- 1 sistema informàtic de processament de dades
- 1 programari de control de l'instrument
- 2 caixes per cobrir bombes de buit



#### **4. Característiques tècniques del subministrament**

##### **4.1 Sistema de cromatografia de gasos Agilent 8890**

- Amb dos ports d'injecció.
- Amb forn de temperatura programable de 4°C sobre la temperatura ambient a 450°C amb resolució de 1°C.
- Amb velocitat de refredament de 4 minuts per passar de 450°C a 50°C amb una temperatura ambient de 22°C.
- Amb forn preparat per cromatografia ràpida amb una velocitat màxima d'escalfament amb rampa de 120°C/min.
- Amb pantalla tàctil que permeti comunicació en temps real amb l'estat de l'instrument la seva configuració i accedir a la informació del pas del flux. Amb accés ràpid a les funcions més importants com l'edició de paràmetres del mètode, diagnòstic, manteniment i registres i pantalles d'ajut.
- Amb tecnologia de flux capil·lar que proporciona connexions capil·lars al forn fiables i sense fuites que resisteixen els repetits cicles del forn de GC amb el pas del temps. Entre d'altres permet simplificar la configuració i el funcionament de les tècniques de retroflux (backflash).
- Amb control electrònic de pressió i flux.
- Amb control electrònic de la pneumàtica basada en tecnologia de micro canals que actuïn com a restrictors per protegir contra contaminants del gas portador com partícules, aigua i olis.
- Amb control de pressió de  $\pm 0,001$  psi en l'interval de 0 a 100 psi, amb possibilitat de poder ajustar els valors programats per a la pressió en increments de 0,001 per a l'interval de 0,000 a 99,999 psi.
- Amb compensació baromètrica automàtica dels canvis de pressió i temperatura ambient per assegurar que els resultats no varien si es modifiquen les condicions ambientals del laboratori.
- Amb injector Split/splitless amb rang de 0-100 psi i 0-1250 ml/min amb H<sub>2</sub> o He i temperatura màxima de 400°C.
- Amb interfase per al detector MS/MS de temperatura variable de 100 a 350°C.
- Amb de canvi ràpid de septums i liners, que permeti a l'usuari canviar aquests elements sense eines i sense la necessitat de refredar els equips.
- Amb funció de congelació dels temps de retenció, que calibri els temps de retenció dels diferents compostos, mirant les variacions que es donin en diferents anàlisis i conseqüentment amb ells, ajusti de forma automàtica la pressió del cromatògraf corregint els temps de retenció resultants per a que coincideixin. Aquesta funció ha de permetre crear llibreries basades en temps de retenció que, juntament amb la informació espectral, ajudin a la confirmació de possibles positius.
- El cromatògraf de gasos ha d'incorporar una interfície d'usuari basada en un navegador que proporcioni accés a la informació del GC independentment del programari que s'utilitzi i permeti:
- Connectivitat per comprovar l'estat de l'equip i per executar diagnòstics autònoms sense intervenció de l'usuari
- Manteniment autoguiat des de qualsevol lloc dins de la xarxa.
- Edició de mètodes i seqüències sense necessitat d'un sistema de dades.



- Amb etiquetatge My Green Lab - ACT Label (responsabilitat, coherència i transparència) que proporcionin informació sobre l'impacte ambiental de la fabricació, ús i eliminació del detector i del seu embalatge.

#### **4.2 Detector de masses de triple quadrupol Agilent 7010D.**

- Equipament d'espectrometria de masses en tàndem amb analitzador de triple quadrupol.
- Font de ionització per impacte electrònic, de doble filament i alta sensibilitat, amb reducció del soroll químic i del minimització del manteniment requerit.
- Energia de ionització variable entre 10 y 300 eV i voltatge del filament modificable per l'usuari.
- Rang de masses des de 10 a 1050 m/z.
- Velocitat d'escombrat fins a 20000 uma/s i capacitat per fer fins a 800 transicions/s.
- Capacitat per adquirir en MRM i SCAN simultàniament.
- Energia de col·lisió modificable fins a 60 eV.
- Resolució: variable, des de 0,4 Da fins a 4,0 Da.
- Cel·la de col·lisió hexapolar amb nitrogen i quenching per heli, que s'afegeix al N<sub>2</sub> per evitar la formació de molècules de He metaestables que incrementen notablement el nivell de soroll químic, millorant així la relació S/N i acceleració lineal axial que elimina l'efecte memòria entre les transicions.
- Sistema d'insonorització de la bomba de buit externa
- Amb quadrupols monolítics, hiperbòlics i recoberts d'or, d'alt caràcter inert. Permet una millor estabilitat davant de canvis de temperatura, una superfície inert amb una major resistència a contaminacions i eliminant la necessitat de la seva neteja, reduint el nivell de soroll i augmentant el límit de quantificació i proporcionant estabilitat analítica al llarg del temps. Les superfícies d'or es mantenen netes i no requereixen manteniment a altes temperatures, de fins a 200° C.
- Escalfament independent de la font, dels quadrupols i la interfase GC/MS,
- Temperatura de la font variable entre 150° a 350°C.
- Temperatura dels quadrupols variable de 106° a 200°C.
- Rang dinàmic > 6.0 ×10<sup>7</sup> contes
- Sistema de buit, format per bomba turbomolecular de dues etapes, que permet un flux total de gas de fins a 8 mL/min.
- Comprovació de fugues en temps real
- Especificació de rendiment:
- Límit de Detecció de l'instrument (IDL) per a impacte electrònic MRM: 0.3 fg d'OFN (octafluoronaftalè), amb un nivell de confiança estadística del 99% de precisió d'àrea (<4% RSD) de 8 injeccions consecutives d'1 µL en mode splitless de 1 fg/µL de OFN (octafluoronaftalè) per a la transició MS/MS de m/z 272→222, amb 100 mseg de dwell time, utilitzant una columna de 30 m × 0.25 mm, 0.25 µm. Amb heli com a gas portador.

#### **4.3 Sistema informàtic:**

- 1 Ordinador amb Windows 11
- Un monitor de 24 polsades
- Amb paquet Office



#### **4.4 Programari de control de l'instrument MassHunter Workstation para GC-MS/MS.**

- Programari MassHunter de control del sistema de cromatografia de gasos i de l'espectròmetre de masses multitarea, que controli tots els paràmetres:
- Modes d'adquisició: MS1 Scan, MS2 Scan, MS1 SIM, MS2 SIM, MRM, dMRM, tMRM, MRM/scan, dMRM/scan, tMRM/scan, Product Ion, Precursor Ion, Neutral Loss, i Neutral Gain
- SWARM Autotune: automatitza l'ajust fi del rendiment del GC/TQ de manera ràpida.
- MassHunter Optimizer per a GC/TQ, que permet el desenvolupament altament automatitzat de mètodes d'adquisició de dades MRM. Aquesta eina permet un estalvi de temps significatiu i redueix la revisió manual en el desenvolupament de mètodes GC/TQ. Els avantatges són l'estalvi de temps per desenvolupar un mètode MRM optimitzat, l'automatització i la reducció del treball manual.
- Inclou la funció de deconvolució espectral, que millora la confiança en la selecció de ions precursors en presència d'interferències.
- Triggered MRM (tMRM): és un mode d'adquisició dependent de dades que permet recollir fins a deu transicions de MRM per compost. En un mètode MRM, es poden adquirir fins a 10 transicions MS/MS per a cada analit i combinar-les en un espectre de ions de producte, que s'utilitza per a la coincidència de biblioteques i proporciona una major confiança d'identificació. El mètode d'adquisició MS/MS utilitza tMRM, proporciona una major confiança en la identificació de l'analit mitjançant l'adquisició de tMRM addicionals quan un dels MRM primaris supera un llindar d'abundància establert.
- Software de congelació dels temps de retenció
- Calculadores integrades: de volum de vapor, de ventilació de dissolvents i de translació de mètodes.
- Mode de repòs/despertador programat per l'usuari, que estalvia gas i energia
- Previsió de manteniment anticipat: (EMF): comptador d'injeccions, temps d'operació i registres electrònics per ajudar al manteniment planificat.
- Total compatibilitat dels arxius generats en els GC/MS actuals del laboratori amb el nou software. Així mateix, a la inversa: els arxius generats amb el nou GC/MS/MS són totalment compatibles amb el software existent al laboratori.

#### **4.5 Caixes per ubicar les bombes de buit Quiet Cover II**

- 2 caixes que permetin la reducció del soroll de les bombes per sota de 50 dB.
- Les caixes han de tenir un sistema de refrigeració automàtic i amb control electrònic que avisi si les bombes s'escalfen en excés.
- Les mides de les caixes no poden sobrepassar els 30,5 cm d'ample, 42 cm d'alçada i 76,5 cm de profunditat.
- El disseny ha de ser suficientment ergonòmic per evitar haver d'aixecar les bombes i manipular-les quan estiguin calentes, alhora que ha de facilitar realitzar les tasques de manteniment (canvi d'oli de les bombes, etc.).

### **5. Instal·lació**

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



## 5.1 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.

La instal·lació ha d'incloure la ubicació del detector de masses de l'equip 1933 en l'equip 1528, amb les posteriors operacions de verificació de correcte funcionament de la línia 1528.

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

## 6. Posada a punt d'aplicacions analítiques

L'equip ha de poder assolir el límit de quantificació (LQ) de 0,002 mg/Kg en mostres de blat de moro i fulla de fruiter per tots els analits de la taula següent. **S'haurà de comprovar en el mes posterior a la seva instal·lació que l'equip compleix el límit anterior, al menys en el 80% dels analits de la següent taula:**

|                                  |                          |                   |
|----------------------------------|--------------------------|-------------------|
| 2-Phenylphenol                   | Ethion                   | Pirimiphos-methyl |
| Acrinathrin                      | Ethoprophos (Ethoprop)   | Procymidone       |
| Aldrin                           | Etofenprox (Ethofenprox) | Profenofos        |
| Azinphos-ethyl                   | Etrimfos                 | Propiconazole I   |
| Azinphos-methyl                  | Fenarimol                | Prosulfocarb      |
| BHC-alpha (benzene hexachloride) | Fenazaquin               | Pyraflufen-ethyl  |
| BHC-beta                         | Fenitrothion             | Pyrazophos        |
| Bifenthrin                       | Fenthion                 | Pyridaphenthion   |
| Bromopropylate                   | Fenvalerate I            | Quizalofop-ethyl  |
| Buprofezin                       | Fenvalerate II - Esfen   | Tebufenpyrad      |
| Chinomethionat                   | Fipronil                 | Tefluthrin, cis-  |
| Chlordane-cis (alpha)            | Fipronil sulfone         | Terbumeton        |
| Chlordane-trans (gamma)          | Fluvalinate-tau-I        | Tetradifon        |
| Chlorfenapyr                     | Formothion               | Tetramethrin I    |
| Chlorfenvinphos                  | Heptachlor               | Tolclofos-methyl  |
| Chlorobenzilate                  | Heptachlor epoxide cis   | Triadimefon       |
| Chlorothalonil                   | Heptachlor epoxide trans | Triadimenol       |
| Chlorpyrifos                     | Hexachlorobenzene        | Triazophos        |
| Chlorpyrifos Methyl              | Hexaconazole             | Vinclozolin       |
| Chlozolate                       | Iprodione                |                   |
| Coumaphos                        | Kresoxim-methyl          |                   |
| Cyfluthrin                       | Lindane                  |                   |
| Cyhalothrin I (lambda)           | Malathion                |                   |
| Cypermethrin                     | Mepanipyrim              |                   |
| Deltamethrin                     | Metalaxyl                |                   |
| Diazinon                         | Methidathion             |                   |



|                           |                  |  |
|---------------------------|------------------|--|
| Dichlofluanid             | Methoxychlor     |  |
| Dicloran                  | Molinate         |  |
| Dieldrin                  | Myclobutanil     |  |
| Difenoconazole I          | Nuarimol         |  |
| Dimethoate                | Parathion ethyl  |  |
| Diphenylamine             | Parathion Methyl |  |
| Endosulfan (alpha isomer) | Penconazole      |  |
| Endosulfan (beta isomer)  | Permethrin I     |  |
| Endosulfan sulfate        | Phenthoate       |  |
| Endrin                    | Phosalone        |  |
| EPN                       | Phosmet          |  |
| Epoxiconazole             | Pirimicarb       |  |

Es farà el traspàs, en el mes posterior a la seva instal·lació, amb l'optimització corresponent, dels mètodes de residus de plaguicides, que tinguin en l'abast d'acreditació del Laboratori Agroalimentari.

## 7. Formació

El subministrament inclourà formació avançada de 4 dies en GC-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.

## 8. Garantia

La garantia de l'equip ha de ser d'un any 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.

## 9. Lloc de lliurament de l'equip

Els components hauran de ser lliurats a les dependències del servei de Laboratori Agroalimentari, ubicat al carrer Camí de Mataró, número 1, 08348, de Cabrils.

## 10. Termini de lliurament

Cinc mesos (20 setmanes) des de la formalització del contracte.



Generalitat de Catalunya  
Departament d'Agricultura,  
Ramaderia, Pesca i Alimentació  
**Direcció General d'Empreses  
Agroalimentàries, Qualitat i Gastronomia**  
Subdirecció General de Transferència i Innovació Agroalimentària  
Laboratori Agroalimentari

## **11. 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 els procediments previstos per l'empresa subministradora i realitzada la posta a punt d'aplicacions analítiques prevista en el punt 6.

Joan Gòdia Tresàncez  
Director General d'Alimentació, Qualitat i Indústries Agroalimentàries