

PLEC DE PRESCRIPCIONS TÈCNiques PER AL SUBMINISTRAMENT I INSTAL·LACIÓ D'UN EQUIP DE CROMATOGRÀFIA DE GASOS-ESPECTROMETRIA DE MASSES AMB ANALITZADOR DE TRIPLE QUADRUPOLE (GC/MS²(TQ)), AMB DESTINACIÓ ALS CENTRES CIENTÍFICS I TECNOLÒGICS DE LA UNIVERSITAT DE BARCELONA

EXPEDIENT 2025/198

1. OBJECTE

El present plec de prescripcions tècniques (PPT) té per objecte definir les característiques i requisits mínims que hauran de reunir els béns que s'han de subministrar en present licitació.

Un equip de cromatografia de gasos-espectrometria de masses amb analitzador de triple quadrupol (GC/MS² (TQ)) i amb un injector automàtic complet (Líquids, HS, SPME Arrow), amb ubicació a la Unitat d'Espectrometria de masses aplicada-Anàlisi isotòpica dels Centres Científics i Tecnològics de la Universitat de Barcelona (CCiTUB).

Només es descriuran aquells punts que es consideren de major relleu i no es farà constar una descripció exhaustiva i detallada de la totalitat dels components de l'equip. No obstant, una vegada instal·lat, el conjunt instrumental ha de funcionar a plena satisfacció, complint totes i cada una de les especificacions del/dels fabricants.

Abans de l'adjudicació definitiva, la mesa de contractació podrà sol·licitar del proveïdor la informació i documentació complementària, especialment allò que faci referència als aspectes de configuració i/o característiques tècniques de l'equipament ofert.

2. CONSIDERACIONS GENERALS

L'equipament s'integrarà en l'àrea de Química Elemental i Molecular, concretament en el laboratori de GC/MS aplicada de la Unitat d'Espectrometria de masses aplicada-Anàlisi isotòpica.

El nou equipament suposarà la millora de la sensibilitat i selectivitat en la caracterització de compostos orgànics mitjançant GC/MS triple quadrupol i permetrà expandir l'oferta actual de serveis GC/MS i d'aplicacions que se'n deriven als CCiTUB i complementar no tan sols els serveis d'anàlisi molecular sinó també els d'anàlisi isotòpica de compost específic (CSIA) que oferim. El laboratori presta serveis fonamentals per al desenvolupament de la recerca de la pròpia Universitat de Barcelona i de diversos grups de recerca capdavanters, tant de la pròpia UB com d'altres centres públics i privats. Amb aquest equipament es podran identificar i quantificar compostos diana a nivells de femtograms amb alta qualitat analítica. L'equip ens permetrà satisfer part de les demandes dels nostres usuaris, en el sentit de complir amb exigències de rapidesa i d'una detecció fiable més sensible, arribant als límits de detecció cada vegada més baixos que exigeixen les normatives i estudis científics.

A més, l'equipament estarà dotat amb un sistema que permet, de forma automatitzada, introduir la mostra al cromatògraf de diferents maneres. Així doncs, aquest mostrejador automàtic d'elevada precisió, permetrà l'anàlisi directa de mostres líquides (grans volums), anàlisi de compostos volàtils per *Head Space* (HS) i l'extracció d'analits tant per HS com per immersió directa en líquids mitjançant fibres d'alta capacitat (microextracció en fase sòlida, SPME arrow).

L'equipament ens ha de permetre implementar la determinació de contaminants orgànics persistents en ecosistemes on la seva presència és més baixa (com ara, l'Antàrtida), així com disruptors endocrins que suposen un risc ecotoxicològic per als organismes marins. Una altra de les aplicacions que es podran millorar és l'estudi del volatíloma en mostres bio (plasma, orina, femta) per a un millor coneixement dels processos biològics interns.

1| Expedient 2025/198

Pel que fa a la seva ubicació, l'equip s'instal·larà a l'edifici CCiTUB Solé Sabarís, localitzat al Campus Diagonal Portal del Coneixement, al costat d'altres sistemes GC/MS simples i d'aquesta manera es podrà complementar i expandir l'oferta actual existent a la Unitat d'Espectrometria de masses aplicada-Anàlisi Isotòpica.

3. CARACTERÍSTIQUES TÈCNIQUES

L'instrument que es vol adquirir és un sistema format per un cromatògraf de gasos acoblat a un espectròmetre de masses amb analitzador de triple quadrupol i un mostrejador automàtic que permeti l'anàlisi de mostres líquides, per *Head Space* i SPME (normal i *arrow*). Els licitadors hauran de presentar una proposta que compleixi tots els requisits que es descriuen a continuació.

L'equipament haurà de ser nou, de darrera generació i amb data de fabricació dins els darrers 6 mesos:

3.1 Característiques tècniques que ha de complir l'espectròmetre de masses amb analitzador de triple quadrupol:

- **Font inert d'impacte electrònic (EI) d'alta sensibilitat** feta amb material ultra inert per tal que es mantingui inactiva enfront de compostos reactius, que es pugui escalfar fins als 350°C i estigui proveïda de dos filaments commutables a través del software
- **Filtre de masses format per dos quadrupols** escalfables i **una cel·la de col·lisió** amb capacitat per aportar fins a dos gasos reactants
- **Sistema de detecció** format per un díode d'alta energia i d'un multiplicador d'electrons.

Especificacions a complir:

- Rang de masses de 10 a 1050 uma, en passos de 0,1 uma i relació isotòpica estable al llarg de tot el rang de m/z .
- Velocitat d'escombratge de fins a 20.000 uma/s.
- Resolució seleccionable des de 0,4 fins a 4,0 uma.
- Modes d'adquisició MS: Full scan (Q1 i Q3), SIM (Q1 i Q3), MS/MS: MRM, precursors, productes i pèrdua de neutres.
- Capacitat d'adquisició simultània de MRM(SCAN, dMRM/SCAN en mode sincrònic).
- Velocitat MRM de fins a 800 transicions/s.
- Temps MRM: seleccionable, mínim 0,5 ms per m/z .
- Estabilitat de masses $\pm 0,1$ uma/24 hores.
- Rang dinàmic total de 10^6 .
- Energia d'ionització variable entre 10 i 150eV.
- Voltatge del filament seleccionable.
- Sensibilitat: 1 fg Octafluoronaftalè (OFN) per la transició MS/MS de m/z 272 a m/z 222, amb dwell time de 100 ms; límit de detecció de l'instrument per impacte electrònic MRM: $\leq 0,3$ fg OFN.
- Sensibilitat Impacte electrònic MS/MS: 100 fg OFN S/N > 30.000:1 (transició de m/z 272 a m/z 222), emprant He com a gas portador.
- Automatització via software del cicle de posada en marxa/aturada del sistema de buit.
- Sistema de buit amb bomba turbomolecular amb capacitat mínima de 250l/s i refrigerada per aire.
- Possibilitat de treballar amb He i H₂.

2| Expedient 2025/198

3.2 Característiques tècniques que ha de complir el cromatògraf de gasos

- Cromatògraf de gasos de dos canals amb control electrònic de la pneumàtica complet de cada pressió (P) i de cada flux, amb compensació per variació de la pressió atmosfèrica i temperatura ambiental.
- Capacitat de control de 0,001 psi.
- Repetibilitat del temps de retenció < 0.0008 min ($< 0,008\%$).
- Repetibilitat d'àrees $< 1\%$ RSD.
- Amb interfase capil·lar directa a l'espectròmetre de masses, que es pugui escalfar fins a 350°C .
- Capacitat de fer *backflush*.
- Forn amb capacitat d'instal·lar dues columnes de 100 m.
- Rang mínim de temperatures de funcionament del forn: Tambient+ 4°C a 450°C .
- Resolució de $0,1^{\circ}\text{C}$ del valor programat de temperatura.
- Possibilitat d'aplicar fins a 20 rampes de temperatura amb 21 replans. Velocitat màxima de rampa: $120^{\circ}\text{C}/\text{min}$.
- Velocitat de refredament del forn de $100^{\circ}\text{C}/\text{min}$ (4 min de 450°C a 50°C).
- Dos injectors Split/Splitless, amb control electrònic de pressió de 0-100 psi compensat segons variació de P i T ambientals.
- Temperatura màxima de l'injector: mínim 400°C .
- Mode de estalvi de gas portador.
- Control electrònic del flux de purga del sèptum.
- Rang d'ajustament de flux total (He o H_2): de 0 a 1250 ml/min.
- Possibilitat de treballar amb He i H_2 .

3.3 Característiques tècniques que ha de complir el mostrejador automàtic

- Automostrejador robotitzat tipus X,Y, Z amb injecció mitjançant xeringa.
- Injecció automatitzada de **mostres líquides, headspace i SPME normal i arrow**.
- Braç de com a mínim 120 cm.
- Amb capacitat d'injectar als dos canals del GC.
- Control local des de controlador amb pantalla LCD.
- Xeringues intel·ligents.
- Software de control integrat al software del GC/MS.
- Possibilitat de superposició de temps de preparació de mostra i temps d'anàlisi de mostra, també per SPME *arrow*.
- Mòdul per a la injecció de mostres líquides (capacitat > 50 vials 2 ml).
- Mòdul de *Headspace* amb forn incubador per a vials de 2/10/20 ml, agitador, escalfador de xeringa.
- Mòdul SPME *arrow* amb estació condicionadora de fibres amb agitador/escalfador específic per a SPME *arrow* i velocitat seleccionable de 0 a 1600 rpm.

3.4. Sistema informàtic i programari de control:

L'equip haurà de disposar d'un sistema informàtic amb ordinador de darrera generació, des del qual es puguin controlar i programar totes les seves funcions amb el programari corresponent.

El **sistema informàtic** haurà de constar de:

- CPU Intel Core i5-10500 (3.1 GHz, 12MB cache) o superior.
- Memòria disc dur 500GB.
- 16GB RAM.
- Monitor 24" o superior.
- Dues targetes de xarxa LAN 10/100.
- Windows 11 Pro (64Bits).
- Impressora làser.

Programari de control

Es valorarà el conjunt de prestacions que ofereixi el programari, com ara eines per a la **millora en qualitat i reducció del temps** en el reprocessat de dades. Haurà de complir amb:

- Ha de permetre el control, adquisició i el tractament de dades.
- Multitasca i multiinstrument, amb capacitat de control de dos equips de GC/MS.
- 10 llicències oficials addicionals de software per a reprocessat de dades offline.
- Visibilitat immediata de tots els paràmetres del GC, MS i del mostrejador.
- Control del GC/MS, control de seqüència i cromatograma s'han de visualitzar en temps real durant l'anàlisi en una mateixa pantalla.
- Ha de permetre programar en el temps altres paràmetres, com ara el tipus d'espectre SCAN, SIM o MRM (entre d'altres mètodes) i el control automàtic dels processos de calibratge.
- Emmagatzematge dels cromatogrames al disc per la seva avaluació posterior, així com dels paràmetres d'adquisició de dades.
- Funció que permeti processar les dades abans d'acabar l'anàlisi i de forma simultània amb l'adquisició de dades.
- Control automatitzat de les eines de sintonitzat automàtic des del programari de control de l'equip per tal de maximitzar la sensibilitat, i amb possibilitat d'incloure-ho com un paràmetre més del mètode.
- Possibilitat de fer sintonitzat de manera manual (*manual tune*).
- El programari d'anàlisi quantitativa pren les dades directament obtingudes en l'adquisició. El disseny dels paràmetres d'integració per a les dades de MRM es poden seleccionar en base a cada compost sense necessitat de predefinir l'amplada de pic.
- Possibilitat de fer 100 finestres temporals amb 60 ions cadascuna.
- Recalibratge automàtic al reintegrar-se els pics d'una recta de calibratge.
- Assistent per a la selecció del tipus de regressió que millor s'ajusti als punts de calibratge. Recàlcul automàtic de tots els valors de la quantificació.
- Ha de permetre carregar de manera simultània múltiples fitxers de dades per a facilitar una revisió ràpida, així com automatitzar tasques al carregar els fitxers (extracció de determinats ions, integració, entre d'altres).
- Els fitxers amb dades processades han de quedar arxivats.
- Possibilitat de revisió de la totalitat d'anàlisis d'un lot de mostres.
- Possibilitat d'establir toleràncies basades en valors de S/N, recuperació, abundàncies relatives d'ions, controls de qualitat, exactitud, precisió, temps de retenció, etc. El programari de forma automàtica avisa a l'usuari amb missatges i codis de colors quan les dades experimentals no satisfan alguna de les toleràncies establertes.
- Editor de mètodes per a facilitar el desenvolupament de mètode SCAN i SIM amb importació automàtica d'ions i transicions, des del fitxer corresponent a l'anàlisi.
- Comptadors amb límits per avisar del manteniment de diferents components del sistema (sèptum, liner, ..).

4| Expedient 2025/198



- **Programari amb diferents nivells de seguretat per tal de limitar accés a determinades dades.**
- Capacitat de cerca i creació de llibreries pròpies d'espectres de masses, fer informes de puresa de pic, cerca per paràmetres i mostrar les estructures al mateix temps que els resultats de la cerca automàtica en llibreries.
- Ha d'incloure la darrera versió de la llibreria NIST.
- Manteniment preventiu assistit pel programari, a través de pantalles de diagnòstics que guiïn a l'usuari per a detectar/corregir possibles anomalies de funcionament.
- Amb vídeos incorporats de les operacions de manteniment.

Tots els mòduls que constitueixen l'equip han de ser del mateix fabricant, amb un únic servei tècnic i que garanteixi una total compatibilitat entre si, controlats des d'una única plataforma de programari.

El licitador ha d'acreditar una infraestructura dins del territori espanyol capaç d'oferir un servei tècnic adequat quan sigui requerit.

4. FORMACIÓ EN L'ÚS DE L'EQUIP

L'adjudicatari es compromet a realitzar la formació a tot el personal tècnic que correspongui, en un mínim de tres dies.

Aquesta formació ha de permetre el màxim aprofitament de l'equip, un cop instal·lat i verificat, tant en el seu ús correcte i òptim com en el manteniment bàsic de l'equip, verificació i calibratge.

S'inclouran tots els manuals (d'ús, tècnics, manteniment).

5. GARANTIA

Garantia d'un any, a partir de la data en que l'equipament es trobi instal·lat al laboratori assignat i demostrat que l'equip funciona segons les especificacions tècniques.

Barcelona,

Juan Fran Sangüesa
Director
Centres Científics i Tecnològics