Prescripcions tècniques per a la contractació del subministrament d'un detector d'espectrometria de masses d'alta resolució i massa exacta (QTOF) pel Laboratori Agroalimentari

1. Objecte del contracte

L'objecte del contracte és el subministrament i instal·lació d'un detector d'espectrometria de masses d'alta resolució i massa exacta (QTOF) pel Laboratori Agroalimentari que es pugui connectar al cromatògraf líquid Acquity model ACQUITY UPLC XS amb número d'inventari 1878.

2. Components del subministrament

Components de l'equip:

- 1 d'un detector d'espectrometria de masses d'alta resolució i massa exacta (QTOF) SCIEX ZENOTOF 7600+
- 1 sistema informàtic de processament de dades
- 1 programari de control de l'instrument
- 1 sistema de generació de Nitrogen i aire (generador + compressor)
- 1 taula pel detector d'espectrometria de masses d'alta resolució i massa exacta (QTOF) SCIEX ZENOTOF 7600+
- Paquet Office
- Instal·lació
- Posada a punt d'aplicacions analítiques
- Formació

3. Característiques tècniques del subministrament

3.1. Detector d'espectrometria de masses d'alta resolució i massa exacta (QTOF) SCIEX ZENOTOF 7600+.

3.1.1. Font de disseny ortogonal, Turbo V™:

- Amb sondes de ionització: una sonda ESI amb dos canals d'entrada i una sonda APC amb codificació única per a la identificació automatitzada en el programari.
- Amb capacitat d'intercanviar ràpidament els modus de ionització entre APCI i ESI.
- Amb sistema de calibratge integrat en la font per facilitar l'accés dels patrons de calibratge de l'equip.
- Amb disseny d'esprai ortogonal per tal d'assolir una distribució de temperatura uniforme i un flux de gas de cortina optimitzat a l'objecte de contribuir a la robustesa del sistema.
- Amb disseny de la font d'ions "plug and play" que permet col·locar i treure la font sense eines.
- Amb escalfadors ceràmics d'alta capacitat, autolimpiables i d'alta temperatura amb sensors de temperatura integrats per afavorir la màxima desorció iònica de les gotetes ESI en la font.
- Amb rangs de flux de 5 µl/min fins 3 ml/min.
- Amb temperatura de de solvatació des de temperatura ambient a 750ºC.
- Amb compatibilitat de solvent de 100% aquós a 100% orgànic i capacitat de gradient complert.

3.1.2. Sistema de separació del tipus cortina de gas entre la zona de pressió atmosfèrica i la de buit: El sistema ha de disposar d'un mecanisme de separació mitjançant cortina de

Camí de Mataró, nº 1
08348 Cabrils (Maresme)
Tel.: 93 750 82 11
laboratoriagroalimentari.agricultura@gencat.cat
http://agricultura.gencat.cat

gas entre la zona de pressió atmosfèrica i la zona de buit, que permeti mantenir l'analitzador de masses net i assegurar una transferència eficient d'ions sense necessitat d'escalfament addicional

3.1.3. Guia d'ions d'alta pressió QJET Ion Guide, seguida d'un qudrupol previ (Q0) des de la font fins l'analitzador de masses per millorar l'enfoc dels ions i maximitzar la resolució i la transmissió especialment en masses altes.

3.1.4. Disseny òptic N-optic desing amb orifici de 4 mm d'entrada al tub d'acceleració, TOF per obtenir alta resolució sense comprometre sensibilitat.

3.1.5. Amb camí òptic del TOF termostatitzat amb sistema Six heater drones que mantinguin l'estabilitat i la precisió de massa de treball sense afectacions per la temperatura ambient.

3.1.6. Amb alta velocitat en MS/MS en mostres reals: de fins 133 espectres MS/MS per segon (133Hz) per poder treballar amb cromatografia ultraràpida.

3.1.7. Amb cel.la de col·lisió EAD (dissociada activada per electrons):

- Permet una fragmentació selectiva i programable dels compostos d'interès, per a la seva elucidació estructural complerta e identificació.
- Permet fragmentar en EAD, en CID (dissociació induïda per col.lisió) o en les dues simultàniament.

3.1.8. Amb tampa d'acumulació i concentració d'ions fragment produïts en la cel.la de col·lisió ZenoTrap

- Permet reduir las pèrdues d'ions entre la cel.la de col·lisió i l'accelerador TOF que permet augmentar la sensibilitat per a l'adquisició d'espectres de fragmentació MS/MS.

3.1.9. Combinació Trampa de Zeno i EAD

- Permet:
  - Caracteritzar molècules grans
  - Disucidad isòmers posicionals en petites molècules i lípids
  - Identificar i quantificar metabòlits a alta velocitat
  - Identificar analts residuals
  - Obtenir espectres d'alta qualitat que milloren la identificació en llibreries per l'anàlisi de productes desconeguts.

3.1.10. Especificacions tècniques

- Sensibilitat en TOF/MS: en modo ESI positivo per a una injecció de 1 pg de reserpina en columna, amb una relació S/N > 2500
- Sensibilitat en MS/MS: en modo ESI positivo per a una injecció de 50 fg de reserpina en columna, amb una relació S/N > 400.
- Sensibilitat en TOF/MS: en modo ESI negativo per a una injecció de 100 fg de Cloranfenicol en columna, amb una relació S/N > 1000
- Sensibilitat en MS/MS: en modo ESi negativo per a una injecció de 100 fg de Cloranfenicol en columna, amb una relació S/N > 1500
- Velocitat d'escombrat en MS/MS: Fins 133 Hz (133 espectres MS/MS por segon)
- MS/MS duty cycle: ≥ 90% per adquisició en TOF MS/MS
- Resolució MS: superior a 42,000 (FWHM) m/z 956.
- Exactitud de massa Interna: menor de 0.2 ppm de error absolut, demostrada en MS/MS en un fragment de [Glu]1-Fibrinopeptide B
- Exactitud de massa externa: menor de 2 ppm RMS sobre 12 hores de treball de LC-MS
- Rang dinàmic linear: Millor de 5 ordres de magnitud sense pèrdua de senyal.
- Rang de masses: En el TOF, 40 kDa, en Ion Precursor, 5-2.250 m/z (5-40.000 m/z)
- Rang de flux de treball: Des de 5 µL/min fins 3 mL/min

- Modus avançats d'adquisició de dades: Full Scan TOF MS, Full Scan TOF MS/MS, MRMHR, Data Dependent (DDA), Data Independent (DIA), Zeno SWATH DIA y ZT SCAN
- Modus de fragmentació: cel.la de col·lisió CID (Disociació Induida per Col·lisió) i cel.la EAD, (Dissociació Activada por Electrons)
- Detector basat en ADC/TDC dual de ampli rang dinàmic i comptatge de polsos.

3.2. Sistema informàtic:

- 2 Ordinadors amb processador d'última generació un d'ells per treballar en remot
  - Intel Xeon W3-2435, Processador de 8 núclis (3,1 GHz)
  - Memòria RAM de 32 GB (2X16GB DDR4 3200MHZ RDIMM ECC)
  - Teclat multimedia i ratolí òptic
  - Monitor Dell de 27"i un segon monitor de 27"
  - El sistema disposa d'un sistema de recuperació intern (auto copiat de discos).
  - 2 unitats de disc dur d'estat sòlid de 2 TB en RAID i disposa 32 GB de RAM (2 x 16 GB DDR4 3200 MHz RDIMM ECC).
  - El maquinari addicional inclou un ratolí òptic i un teclat multimèdia.
  - El sistema conté una imatge cibersegura de Windows 10 IoT Enterprise 2021 LTSC.
  - Aquest PC és conforme amb la normativa RoHS i pot funcionar com a ordinador independent de processament i/o adquisició.
  - Amb Synology DiskStation i un centre d'emmagatzematge compacte DiskStation® DS425+

3.3. Programari de control de l'instrument: paquet de software ScieX OS per a adquisició i processat

- Pel control del sistema complert, tant el detector SCIEX ZENOTOF 7600+ de nova instal·lació com el cromatògraf ACQUITY UPLC XS amb número d'inventari 1878 existent al laboratori.
- Amb llicència Software Sciex OS-Q per a l'adquisició i processat de dades d'HRMS i massa exacta.
- Amb llicència Software Sciex OS-Q per al processat de dades per instal·lar en un PC addicional de processat.
- Amb Llibreria SCIEX All-in-one amb llicència electrònica anual per instal·lar en el PC d'adquisició o en PC addicional de processat de dades.
  La llibreria conté espectres d'alta resolució de MS i MS/MS en modus d'ions positius i negatius, amb més de 3900 compostos que inclou:
  - Plaguicides
  - Micotoxines
  - Antibiòtics
  - Fluoroquímics
  - Forense
  - Metabòlits i productes natural
- Amb llibreria NIST 2023 MS/MS: amb llicència permanent per instal·lar en el PC d'adquisició o en PC addicional de processat de dades . La llibreria conté espectres d'alta

resolució de MS i MS/MS en modus d'ions positius i negatius, amb més de 51501 compostos que inclou:
- Productes farmacèutics
- Contaminants ambientals
- Metabòlits vegetals

- Característiques del software ScieX OS-Q
  - 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.
  - Amb control total del sistema (cromatògraf i detector) i dels seus components (sistema de buit, fonts de ionització, paràmetres d'adquisició,...
  - Inclou mòdul de revisió de resultats de quantificació independent del d'adquisició i capacitat de MRM programat en funció del temps de retenció.
  - Permet la generació de llibreries i cerca comparativa, així com un mòdul d'interpretació de fragmentació.
- Amb llicència MS/MSALL amb SWATH™ que permet:
  - Anàlisi quantitatiu de tots els components en una sola injecció.
  - Quantificació en tècniques MS/MS i HRMS
- Amb paquet Office

3.4. Bomba rotatòria externa
- ScieX Dry pumb MSR90

3.5. Sistema de generació de nitrogen i compressor

- Que estigui dissenyat per complir els requeriments específic de subministrament de gas del detector (QTOF) SCIEX ZENOTOF 7600+..
- Amb compressor.

3.6. Taula pel detector amb caixa d'insonorització per a bombes rotatòries externes.

- Que estigui dissenyat per complir els requeriments específic de subministrament de gas del detector (QTOF) SCIEX ZENOTOF 7600+...
- Per poder posar la bomba rotatòria externa.

4. Instal·lació

Tots els components inclosos en aquest subministrament s'han d'instal·lar en el servei al Laboratori Agroalimentari. La instal·lació del nou detector ha d'incloure la retirada del detector i la bomba actualment instal·lats en la línia 1878: Xevo TQXS amb nombre de sèrie WBA0334 i bomba de buit (EBARA VACUUM EVSA30) amb nombre de sèrie DMI00320.

4.1. Sistema cromatogràfic i detector
Instal·lació complerta de l'equip, amb acoblament al cromatògraf líquid Acquity model ACQUITY UPLC XS amb número d'inventari 1878 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, així com per retirar i endur-se el detector Xevo TQXS amb número d'inventari 1878 i nombre de sèrie WBA0334 i la bomba de buit (EBARA VACUUM EVSA30) amb nombre de sèrie DMI00320. Aquest components s'hauran d'eliminar definitivament aportant al laboratori el certificat de destrucció corresponent.

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.

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

5. Posada a punt d'aplicacions analítiques

L'equip ha de poder assolir els límits de quantificació següents amb identificació espectral per HRMS:
Determinació d'esteroides, estilbens, RAL's en orina

?

Analit	MOSTRA add NMC (ppb)
DES-cis	0,25
DES-trans	0,25
Dienestrol	0,5
Hexestrol	0,5
Zeranol	0,5
Taleranol	0,5
Zearalenona	0,5
Alfa-zearalenol	0,5
Beta-zearalenol	0,5
Zearalanona	0,5
Alfa-boldenona	0,5
Beta-boldenona	0,25
Metiltestosterona	0,25
Metilboldenona	0,5
Alfa-trembolona	0,25
Beta-trembolona	0,25
Stanozolol	0,25
Hydroxystanozolol	0,25
Alfa-nortestosterona	0,5
Beta-nortestosterona	0,5
Etinilestradiol	0,5
Beta-clostebol	0,25
Alfa-clostebol	0,25
CLAD	0,25

Es farà el traspàs, amb l'optimització corresponent, del mètodes d'antimicrobians i micotoxines, que tingui 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 a carretera Camí de Mataró núm. 1 de Cabrils (08348).

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 Tresànchez
Director General d'Empreses Agroalimentàries. Qualitat i Gastronomia

Camí de Mataró, nº 1
08348 Cabrils (Maresme)
Tel.: 93 750 82 11
laboratoriagroalimentari.agricultura@gencat.cat
http://agricultura.gencat.cat