

## OPIS PRZEDMIOTU ZAMÓWIENIA

Zmiana z dnia 17.09.2024 r.

Przedmiotem zamówienia jest dostawa wysokorozdzielczego spektrometru mas z analizatorem QTOF pozwalającego na prowadzenie analiz jakościowych i ilościowych w tym analizy SWATH-MS białek.

### I. Kluczowe cechy wysokorozdzielczego spektrometru mas z analizatorem typu QTOF

- A. Spektrometr wyposażony w dwa analizatory mas: pierwszy typu kwadrupol oraz drugi typu analizator czasu przelotu.
- B. Układ optyki jonowej analizatora czasu przelotu stabilizowany do temperatury 60°C.
- C. Minimum dwa reflektory w analizatorze czasu przelotu, odbijające jednokrotnie strumień jonów w każdym z trybów pracy w celu uniknięcia kontaminacji w komorze analizatora.
- D. Tryby pracy: skanowanie MS – Q1 MS i TOF MS, skanowanie MS/MS – TOF MS/MS (Product Ion, MRMHR), skanowanie złożone – DIA (SWATH), DDA (IDA).
- E. Pułapka jonowa zatrzymująca w trybie MS/MS jony przed ich transmisją przez pulser do analizatora TOF.
- F. Dwie kompatybilne metody fragmentacji jonów (np. CID, EXD).
- G. Kompatybilność z posiadanym sprzętem/aparaturą naukowo-badawczą/oprogramowaniem specjalistycznym: ze względu na posiadaną opracowaną metodologię analizy ilościowej SWATH-MS dla dotychczas posiadanego systemu LC-MS TripleTOF5600+ z systemem microLC2 200 Eksigent dla zachowania ciągłości i możliwości kontynuowania analiz, nowy sprzęt i oprogramowanie musi być kompatybilne z dotychczas posiadanym systemem i plikami/formatami danych ilościowych i jakościowych.

#### 1. Minimalne parametry techniczne:

- a) Zakres mas dla analizatora kwadrupolowego nie mniejszy niż 5–2200 m/z oraz co najmniej 40 kDa dla analizatora TOF.
- b) Szybkość zbierania danych nie mniej niż 25 Hz w trybie MS oraz nie mniej niż 125 Hz w trybie MS/MS.
- c) Możliwość zbierania nie mniej niż 200 widm MS/MS w cyklu w trybie DIA **ustawienia nie mniej niż 200 okien Q1 na cykl w trybie DIA.**
- d) Rozdzielczość masy co najmniej 42000 FWHM dla zakresu mas 900-1000 m/z w trybie jonów dodatnich oraz jonów ujemnych.
- e) Zakres dynamiczny spektrometru nie mniejszy niż 5 rzędów wielkości w trybie jonizacji dodatniej oraz ujemnej.
- f) Dokładność masy dla kalibracji wewnętrznej poniżej 0.5 ppm (RMS) w trybie MS/MS dla jonu 120 m/z.
- g) Czułość w trybie jonów dodatnich dla 1 pg rezerpiny co najmniej:  
S/N>2500:1 (RMS) w trybie TOF MS.
- h) Czułość w trybie jonów dodatnich dla 50 fg rezerpiny co najmniej:  
S/N>400:1 (RMS) w trybie TOF MS/MS.
- i) Czułość w trybie jonów ujemnych dla 100 fg chloramfenikolu co najmniej:  
S/N>1000:1 (RMS) w trybie TOF MS.
- j) Czułość w trybie jonów ujemnych dla 100 fg chloramfenikolu co najmniej:  
S/N>1500:1 (RMS) w trybie TOF MS/MS.

#### 2. Źródło jonów:

- a) Kompletne źródło jonów umożliwiające pracę w zakresie przepływu nie mniejszym niż 100 nL/min do 200 µL/min, pozwalające na minimalizację zużyciu próbki oraz uzyskanie wysokiej czułości.
- b) Źródło umożliwiające przepływ w trybie pracy mikroprzepływów z możliwością rozbudowy o nanoprzepływy z szybkim przyłączeniem do właściwego portu.
- c) Pozycje sondy są stałe, nie wymagające regulacji położenia, odpowiednio dostosowane do przepływu fazy ruchomej.
- d) Spektrometr mas wyposażony w łącznik średniociśnieniowy zapewniający bezpośredni kontakt pomiędzy źródłem jonów w którym panuje ciśnienie atmosferyczne, a częścią spektrometru w której panuje wysoka próżnia, mający na celu dodatkowe ogniskowanie jonów.
- e) Procedura czyszczenia źródła jonów niewymagająca zniesienia próżni w spektrometrze.
- f) Możliwość stworzenia metody z zaplanowaną jonizacją, tak aby przepływ został skierowany poza źródło jonów dla przedziałów czasowych, w których eluują związki nie analizowane w eksperymencie, co pozwala zmniejszyć zanieczyszczenia spektrometru.

3. Oprogramowanie:

- a) Oprogramowanie umożliwiające sterowanie spektrometrem, zbieranie danych i ich analizę, sterujące detektorem jak i systemem chromatografii cieczowej, umożliwiające analizę jakościową oraz ilościową związków małocząsteczkowych jak również dużych cząsteczek.
  - b) Możliwość tworzenia własnych bibliotek widm.
  - c) Dedykowane oprogramowanie do analiz proteomicznych z wykorzystaniem danych uzyskanych w trybie DIA, pozwalające na ilościowe profilowanie kilku tysięcy białek w jednym eksperymencie. Możliwość analizy eksperymentów z co najmniej pięcioma warunkami dla co najmniej 10 000 przebiegów LC-MS/MS. Licencja roczna.
4. Wysokoprzepustowy zestaw do mikro chromatografii cieczowej pozwalający na ciągłą pracę dzięki zastosowaniu podwójnego układu pomp i podwójnego nastrojku:
- a) Zakres przepływu pierwszego modułu nie mniejszy niż w zakresie od 1.0 uL/minutę do 10 uL/minutę bez podziału strumienia przy ciśnieniu 10 000 psi. Przepływ ciągły, bez pulsacji, objętość opóźnienia gradientu nie większa niż 3 uL.
  - b) Zakres przepływu drugiego modułu nie mniejszy niż w zakresie od 5.0 uL/minutę do 50 uL/minutę bez podziału strumienia przy ciśnieniu 10 000 psi. Przepływ ciągły, bez pulsacji, objętość opóźnienia gradientu nie większa niż 3 uL.
  - c) Pompa ładująca o zakresie przepływu 20-200 uL/min.
  - d) Zestaw pracujący w zakresie pH nie mniejszym niż 2 do 10.
  - e) Możliwość tworzenia dwuskładnikowego gradientu z czterech rozpuszczalników.
  - f) Aktywny system przemywania uszczelnień tłoków oraz tłoków.
  - g) Automatyczny podajnik próbek pozwalający na dozowanie z sześciu mikro płytek 96/384 dołkowych lub z sześciu 54 pozycyjnych statywów na fiolki o pojemności nie mniejszej niż 2.0 mL.
  - h) Zakres termostataowania przedziału próbek 4-40°C z ustawieniem temperatury z krokiem co najmniej 0.1°C i dokładnością nie gorszą +/- 1.0°C oraz stabilnością nie gorszą niż +/- 1.0°C.
  - i) Minimalna nastrojkiwana objętość próbki nie większa niż 3 uL z fiolki 2 mL.
  - j) System chromatograficzny w pełni kontrolowany z poziomu oprogramowania spektrometru mas.
  - k) Precyzja i powtarzalność objętości nastrojkiwanej dla pełnej pętli mniejsza niż 1% RSD
  - l) Błąd przeniesienia objętości nastrojkiwanej mniejszy niż 0.005% wyznaczony dla benzofenonu.
  - m) Powtarzalność czasu retencji nie gorsza niż 0.5% RSD dla przepływu 20 uL/min.
  - n) Sześcioportowy zawór nastrojkowy z kapilarami 1/32".
  - o) System chromatograficzny w pełni kontrolowany z poziomu oprogramowania spektrometru mas.

**II. Wyposażenie i wymagania dodatkowe:**

1. Bezolejowa sprężarka typu scroll o mocy silnika przynajmniej 3,7 KW wyposażona w zbiornik: 0,35 m<sup>3</sup>/min i wymrażacz wilgoci.
2. Sprężone powietrze po schłodzeniu musi trafiać do zbiornika, wyposażonego w spust kondensatu. Za zbiornikiem ze sprężonym powietrzem zainstalowany musi być wymrażacz, również wyposażony w spust kondensatu. Sprężarka musi być wyposażona w kompensatory drgań umieszczone pomiędzy podłogą a ramą nośną urządzenia.
3. Sprężarka podczas pracy nie może generować hałasu przekraczającego 57 dB (A).
4. Generator gazów:
5. Membranowy generator gazów zasilany sprężonym powietrzem o jakości 1:4:1 według ISO 8573-1 lub równoważnego.
6. Każdy ze strumieni gazów musi posiadać osobne wyjście i być regulowany za pomocą odrębnego regulatora ciśnienia i przepływu.
7. Praca w zakresie ciśnień na wejściu od 8,3-10 bar
8. Generator musi dostarczać wszystkie gazy niezbędne do pracy spektrometru, poszczególne strumienie gazów muszą spełniać następujące wymagania:
  - a) Azot:  
Wydajność co najmniej 38L/min o ciśnieniu do 7,6 bara (110 PSI).
  - b) Powietrze 1 linia:  
Wydajność co najmniej do 52L/min o ciśnieniu do 7,6 bara (110 PSI).
  - c) Powietrze 2 linia:  
Wydajność co najmniej do 50L/min o ciśnieniu do 7,6 bara (110 PSI).

9. Zasilacz awaryjny:
  - a) Minimalna moc pozorna: 6000 VA.
  - b) Minimalna moc czynna: 5300 W.
  - c) Możliwość zdalnego wyłączenia.
  - d) Złącze EPO (p.poż.).
  - e) Temperatura pracy: 15 - 25°C.
  - f) Komunikacja: RS 232 i USB.
  - g) Czas ładowania do 90 %: max 4 godziny.
  - h) Czas podtrzymania (100% obciążenia): minimum 5 min.
10. Gniazda wyjściowe: listwa zaciskowa + 2x IEC 320 (10A).
11. Dedykowany mobilny stół pod spektrometr z możliwością umieszczenia w nim pompy olejowej z wentylatorami pozwalającymi na utrzymanie optymalnej temperatury dla pracy pompy oraz wyciszający jej pracę.
12. Mobilna podstawa montażowa pod zestaw mikroUHPLC – dwie sztuki.
13. Zestaw kolumn:
  - a) C18, 2.7µm 160 A 5cm, 300 um – 1 sztuka
  - b) C18, 2.7µm 160 A 5cm, 500 um – 1 sztuka
  - c) 3µm 120 A, 150 x 0.3 mm – 1 sztuka
  - d) 3µm 120 A, 15cm, 500 um – 3 sztuki
  - e) 3µm 300 A, 15cm, 500um – 1 sztuka
  - f) 2.7µm 90 A, 5cm ,500um– 1 sztuka
14. Zestaw elektrod do źródła jonów mikro:
  - a) Elektroda Low Micro dla przepływów 1-10µL/min – 5 sztuk
  - b) Elektroda Micro dla przepływów 5-50µL/min – 5 sztuk
15. Zestaw bezpieczeństwa zabezpieczający rozpuszczalniki przed niekontrolowanym parowaniem i zmianą kompozycji fazy ruchomej oraz dedykowany szczelny zbiornik na zlewki z zabezpieczeniem parowania rozpuszczalników organicznych.
16. Zestaw narzędziowo-złączkowy zawierający niezbędne narzędzia oraz linie transferowe z uszczelnieniami, pozwalającymi na rozruch oraz utrzymanie sprawności zestawu przez co najmniej 12 miesięcy.
17. Upgrade posiadanego oprogramowania MultiQuant 3.0 do SciexOS MQ 3.3. – dwie licencje.
18. Upgrade posiadanego oprogramowania PeakView 1.0 do wersji PeakView 2.1 – jedna licencja.
19. Dedykowane oprogramowanie do analiz proteomicznych z wykorzystaniem danych uzyskanych w trybie DIA, pozwalające na ilościowe profilowanie kilku tysięcy białek w jednym eksperymencie. Możliwość analizy eksperymentów z co najmniej pięcioma warunkami dla co najmniej 10 000 przebiegów LC-MS/MS. Licencja co najmniej roczna.

### III. Szkolenie:

Przeszkolenie 4 pracowników Zamawiającego w zakresie prawidłowej obsługi (m.in. tuning, kalibracja, tworzenie metod do analizy, rejestracja widm), eksploatacji i konserwacji sprzętu – długość szkolenia: 8 godzin zegarowych w miejscu instalacji sprzętu.