

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DEL MOLISE

CAMPOBASSO



Centrale di Committenza

Capitolato Tecnico (allegato al Disciplinare)

Di seguito sono riportate le caratteristiche minime per la fornitura di uno Spettrometro di Massa ad Alta Risoluzione (HRMS) da banco, costituito da tre analizzatori di massa, abbinato ad un sistema di cromatografia a nano flussi e sistema HPLC. La fornitura include inoltre un ulteriore sistema HPLC con rivelatore DAD.

Tali caratteristiche sono ritenute obbligatorie, il mancato rispetto di questi requisiti determinerà l'esclusione dal procedimento:

Caratteristiche tecniche dello spettrometro di massa (HRMS):

Spettrometro di Massa ibrido quadrupolo/alta risoluzione completo di sorgenti ESI (flusso compreso tra 5 ul/min e 1000 ul/min) e sorgente nanoESI compatibile con flussi a partire da 50 nl/min, da destinare ad impieghi di ricerca nei diversi campi delle "scienze omiche" ed in particolare della proteomica. La fornitura deve essere quindi completa in ogni sua parte e di quanto necessario a garantire un livello di prestazioni compatibili con le tecnologie di ultimissima generazione, per essere in grado di eseguire lo studio e la caratterizzazione proteomica e metabolomica in campioni costituiti da matrici complesse. Dovrà pertanto soddisfare le seguenti caratteristiche minime:

- Lo spettrometro di massa deve essere costituito da tre analizzatori di massa funzionanti, il primo costruito su tecnologia quadrupolare, il secondo costruito su tecnologia a trappola ionica lineare, il terzo sulla tecnologia a trappola orbitale (Orbitrap). Ogni analizzatore di massa deve essere in grado di lavorare in sequenza o in parallelo con gli altri.
- Tutti e tre gli analizzatori di massa devono essere in grado di effettuare un'analisi di massa in tempo reale e l'Orbitrap e La trappola Ionica devono essere in grado di rilevare gli ioni e l'elaborazione dei dati in tempo reale, consentendo una elevata frequenza di scansione spettrale. Il funzionamento dei tre analizzatori di massa deve essere gestito da un sistema di Dynamic Scan Management per una massima efficienza operativa.
- Lo spettrometro di massa deve operare nei seguenti intervalli di massa:
 - 50 a 2.000 m / z (rilevamento Ion Trap e Orbitrap);
 - Da 100 a 4000 m / z (rilevamento Ion Trap e Orbitrap).
- Deve essere in grado di isolare gli ioni precursori con analizzatore di massa quadrupolare o con l'analizzatore a trappola ionica.

- Lo strumento deve essere in grado di isolare gli ioni utilizzando l'analizzatore di massa quadrupolare con risoluzione:
 - 0.4 FWHM per 50-1000 m / z;
 - 0,7 FWHM per 1000-2000 m / z.
- Deve essere in grado di accumulare gli ioni in “Multipole Ion Routing”, dispositivo utilizzato per l’accumulo di ioni, frammentazione e successivo instradamento verso gli analizzatori di massa a trappola ionica o Orbitrap.
- Cella di collisione: presenza di una cella di collisione quadrupolare pressurizzata con opportuno gas e in grado di eliminare eventuali effetti di cross-talk.
- Il sistema MS deve essere in grado di eseguire frammentazioni CID, HCD o ETD (quest’ultima come modalità opzionale) in qualsiasi stadio di MSn, con rilevamento di ioni frammento in trappola ionica o Orbitrap.
- Risoluzione ed accuratezza: alta risoluzione (FWHM > 100.000) ed elevata accuratezza (come minimo < 5 ppm con calibrazione esterna) tale da essere in grado di produrre spettri di massa con indicazione

della massa esatta di tutte le specie ioniche rilevate e calcoli accurati delle distribuzioni/rapporti isotopici.

- Mass Resolution e Scan Rate:
 - 240,000 (FWHM) @ m/z 200 (1.5 Hz spectrum repetition rate)
 - Deve essere in grado di scansionare fino a 15 Hz in MS2 utilizzando una risoluzione di 15, 000 at m/z 200.
 - Deve ottenere una risoluzione >450,000 FWHM @ m/z 200 in modalità full scan
- Accuratezza di massa:
 - <3 ppm RMS - con calibrazione esterna
 - <1 ppm RMS - con calibrazione interna
- Range dinamico: lo Spettrometro di Massa deve garantire un range dinamico di almeno 5 ordini di grandezza
- Il sistema a trappola Orbitale FT-MS non deve utilizzare liquidi criogenici per il suo mantenimento.

Caratteristiche tecniche sistema nano-HPLC:

- Pompa binaria con miscelazione in alta pressione operante nel range di flussi da 0 a 1.500 nl/min con tecnologia ProFlow TM in grado di assicurare una RSD sui tempi di ritenzione ≤ 0.2% , pressioni operative fino a 13050 psi (900 bar) nell’intero range di flusso e gradient delay < 25 nl.

- Pompa ternaria (utilizzata nella configurazione di pre-concentrazione, bidimensionale on line e off line, rimozione matrice, ovvero direttamente come pompa micro) operante nel range di flussi da 0 a 2500 ul/min e pressioni fino a 9000 psi (600 bar).
- Comparto per la termostatazione delle colonne cromatografiche in grado di ospitare colonne (fino a 3) con lunghezza fino a 10 cm. Il comparto deve operare nell'intervallo da temperatura ambiente +7°C a 75°C con una accuratezza di $\pm 0.5^\circ\text{C}$, una precisione e una stabilità di $\pm 0.1^\circ\text{C}$.
- Il comparto deve ospitare una valvola a 6 porte e due posizioni remotizzata e controllata da software operante a pressioni massime di 15000 psi, utilizzata per la configurazione di pre-concentrazione o rimozione matrice on-line.
- Autocampionatore in grado di operare fino a 15000 psi su volumi da 0 a 20 ml. L'autocampionatore deve operare e consentire il controllo della temperatura del campione tra 4 e 45°C (fino a 22°C sotto la temperatura ambiente).

Caratteristiche tecniche di n.2 sistemi HPLC:

- Sistema di pompaggio con pressione operativa almeno fino a 700 bar anche ad elevati flussi
- Formazione del gradiente: binario in alta pressione
- Range di Flusso: da 0.001 ml/min a 10 ml/min con incrementi 0.001 ml/min ;
- Precisione del flusso: $< 0.05\%$ RSD con colonne con particelle di piccolo diametro;
- Accuratezza del flusso: $\pm 0,1\%$;
- Presenza di mixer per l'accurata miscelazione di solventi;
- Presenza di sensori di perdita;
- Possibilità di regolare il Gradient Delay Volume in base alle necessità (tuning da 25 a 230 μL)
- Degassatore costruito con materiali a bassa cessione quali PEEK, PTFE, FEP a contatto con i solventi.
- L'autocampionatore deve operare con pressione pari ad almeno 700 bar;
- Capacità di alloggiare almeno 200 vials da 2 ml;
- Possibilità di ospitare loop di diverse dimensioni
- Linearità $> 0,99999$
- Accuratezza dell'iniezione $\pm 0,5\%$ con volume di iniezione a 50 uL
- Precisione dell'iniezione $< 0,25\%$ RSD per iniezione di un volume pari a 3 uL
- Possibilità di effettuare cicli di iniezione rapidi (massimo 8 s in base alle condizioni analitiche)
- Il modulo di termostatazione colonne deve consentire di operare in un intervallo di temperatura da 5°C fino a 85°C.
- Il forno deve essere in grado di ospitare fino a 2 colonne da 30 cm.

- Capacità di riscaldamento del forno colonne in modalità ventilazione forzata e Peltier (selezionabile via software).
- Capacità di acquisizione del dato spettrale e di almeno 8 canali simultaneamente.

La fornitura deve comprendere un Detector UV Diode Array con frequenza di acquisizione del segnale pari ad almeno 125 Hz e la capacità di operare in un range di lunghezze d'onda tra 190-800 nm.

La fornitura deve essere inoltre comprensiva di n°2 personal computer con le seguenti caratteristiche minime:

- PC di ACQUISIZIONE DATI: il computer di acquisizione dati sarà collegato direttamente allo Spettrometro di Massa e dovrà includere le seguenti caratteristiche minime:
 - Workstation basata su processore Intel Core I7 o successivo;
 - 32GB Memory – 512GB SSD + 1TB Hard Drive – DVD Writer;
 - Scheda Grafica;
 - Monitor almeno da 23", VGA, DVI-D
 - 2 schede ethernet
 - Tastiera e mouse forniti in dotazione
 - Software proprietario di gestione e acquisizione dei dati.
- PC di RIPROCESSAMENTO DATI:
 - Processor Intel Core i7
 - 32GB Memory – 512GB SSD + 1TB Hard Drive – DVD Writer
 - VGA Port - PCI Express card 2nd Serial Port (+ 1 Par)
 - Additional PCIe Gigabit Ethernet card (2nd LAN)
 - Mouse & Keyboard
 - Monitor 24" TFT Wide - P24XXH (16:9)
 - Sistema operativo Microsoft Windows 10 Professional

Caratteristiche Software:

- La piattaforma software ed il sistema operativo devono garantire la gestione ed il controllo diretto dell'intero sistema UHPLC/MS.
- Devono essere forniti tutti i software necessari alla migliore gestione della strumentazione oggetto

- dell'offerta: dal tuning dello spettrometro di massa, all'elaborazione dei dati qualitativi e quantitativi, dalla gestione dei dati su fogli elettronici (excel), alla personalizzazione dei report di stampa.
- Deve far parte della fornitura un software in grado di:
 - Effettuare la ricerca di masse esatte e riconoscimento di spettri MS² nell'ambito della metabolomica e in grado di collegarsi a banche dati online (ChemSpider o similari)
 - Attribuire le formule brute e le strutture chimiche dei rapporti m/z rilevati (sia in modalità MS che MS/MS) anche con la possibilità di analisi fine dei pattern isotopici consentita dall'elevata risoluzione di massa.
 - Effettuare una trattazione statistica dei dati, con funzioni quali: PCA, PLS-DA, Volcano Plot e analisi.
 - Differenziale con confronto campioni con n>2.
 - Il software deve essere in grado di verificare la frammentazione in-silico per spettri di frammentazione.
 - MSⁿ per la caratterizzazione strutturale dei composti.
 - Applicare filtri per difetto di massa.
- La fornitura deve essere inoltre completa di un software per identificazione di peptidi e proteine per la ricerca nelle più comuni banche dati e analisi quantitativa proteomica (tagged e label free).
- Software di gestione strumentale ed analisi dati per sistema HPLC completo di detector DAD.

Caratteristiche generali:

- HPLC, spettrometro di massa e software di unico fornitore e produttore.

Formazione del personale e garanzia:

- A seguito dell'installazione e di un primo training di familiarizzazione allo strumento, la ditta aggiudicataria dovrà effettuare un ulteriore corso di addestramento specialistico non inferiore a 6 giorni lavorativi diviso tra le sessioni di proteomica e metabolomica (da concordare nelle modalità);
- Garanzia: 36 mesi.

Il Responsabile del Procedimento

Dott.ssa Rossella Cacchione

Il Direttore Generale

(dott. Valerio Barbieri)

