

**Capitolato per sistema di spettrometria di massa ad elevata risoluzione (HRMS) con analizzatore a trappola orbitale di tipo "Orbitrap" completo di sistema cromatografico UHPLC, detector PDA e software per la gestione e analisi**

Caratteristiche minime\* sistema LC-HRMS

\*tali caratteristiche sono ritenute mandatorie, il mancato rispetto di questi requisiti determinerà l'esclusione dal procedimento

**A. Spettrometro di Massa ad Alta Risoluzione**

1. Spettrometro di Massa da banco in alta Risoluzione basato su tecnologia quadrupolo/detector ad alta risoluzione che lavori in trasformata di Fourier;
2. Lo spettrometro di Massa deve essere in grado di separare gli ioni di diverso valore di massa/carica senza l'utilizzo di campi magnetici generati da magneti a superconduzione;
3. Accuratezza di massa:
  - < 1 ppm (con calibrazione interna)
  - < 3 ppm (con calibrazione esterna);
4. Risoluzione (R):
  - 120.000 misurata a m/z 200, per ogni modalità di scansione ed in entrambe le polarità;
5. Quadrupolo con capacità di isolare i precursori con banda passante fino a 0,4 Da;
6. Dotato di cella di collisione per la frammentazione MS/MS;
7. Interfaccia "Elettrospray" riscaldata (ESI), in grado di operare in ionizzazione positiva e negativa con flussi massimi compresi tra 1 e 1000 uL/min, senza necessità di ripartizione;
8. Deve permettere acquisizioni in "Full Scan" ad alta risoluzione in un range di massa compreso tra 40 e 3000 amu;
9. Modalità di acquisizione MS/MS in alta risoluzione;
10. Acquisizione di dati in modalità contemporanea "Full Scan-MS/MS";
11. Modalità di acquisizione di spettri SIM (Single Ion Monitoring) e MS/MS in "Multiplexing", tale che più ioni precursori (almeno 20) possano essere raccolti e preselezionati per il rilevamento in alta risoluzione, con riduzione del tempo di ciclo analitico e incremento del numero di misurazioni all'interno del picco cromatografico;
12. Modalità di acquisizione di tipo "Data Dependent Scan";
13. Switching di polarità: il sistema deve eseguire un ciclo completo in Full Scan (una scansione completa sia in polarità positiva che negativa) in un tempo  $\leq 720$  milli-secondi ad una Risoluzione fissata e pari a 60.000 FWHM;
14. Presenza di capillare per il trasferimento degli ioni in massa removibile senza interruzione del vuoto;
15. Deve essere dotato di sistema di infusione diretta a mezzo siringa;
16. Dotato di sistema di insonorizzazione della pompa rotativa.

**B. Sistema di cromatografia liquida ad alta efficienza**

1. Il cromatografo dovrà essere in grado di operare sia con colonne HPLC classiche sia con colonne con impaccamento di dimensioni inferiori a  $2\mu\text{m}$  (UHPLC);
2. Il sistema di pompaggio dovrà essere a gradiente binario con miscelazione ad alta pressione;
3. Flusso operativo compreso tra 0,001 – 8 mL/min con incrementi di  $1\mu\text{L}/\text{min}$ ;
4. Possibilità di selezionare per la miscelazione binaria da un numero massimo di sei eluenti;
5. Precisione del Flusso:  $\leq 0.05\%$  RSD;
6. Il sistema dovrà essere in grado di operare a contropressioni superiori a 1000 bar;
7. Autocampionatore con volume di iniezione compreso tra 0,01 -25  $\mu\text{l}$ ;

8. Autocampionatore termostato tra 4-40°C;
9. Possibilità di alloggiare oltre 200 vials da 2 mL;
10. Carry Over <0,0004% con Caffeina;
11. Accuratezza del volume di iniezione:  $\pm 0,5\%$  per 10  $\mu\text{l}$  di H<sub>2</sub>O;
12. Compartimento Colonna in grado di lavorare sia in modalità aria statica che ventilazione forzata;
13. Possibilità di alloggiare almeno due colonne da 30 cm di lunghezza;
14. Compartimenti Colonne operativi tra 5-120°C con incrementi di 0,1°C;
15. Stabilità della temperatura dei Compartimenti Colonne:  $\pm 0.05\text{C}$ ;
16. Valvole: Possibilità di alloggiare fino a 2 valvole nel compartimento della colonna (2 posizioni/6porte o 6 posizioni/7porte);
17. Sensori di perdita (leak sensor);
18. HPLC, DAD e Spettrometro di Massa di unico fornitore e produttore.
19. Detector UV Diode Array con le seguenti caratteristiche:
  - Capacità di operare in un range di lunghezze d'onda compreso tra 190-800 nm.
  - Banco ottico composto da 1024 fotodiodi;
  - Frequenza di acquisizione del segnale almeno fino a 250 Hz.

#### **C. Software**

1. La piattaforma software deve garantire la gestione ed il controllo diretto dell'intero sistema;
2. La piattaforma si intende inclusa di tutti i software/tool 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;
3. Il software deve includere gli algoritmi in grado di ottenere le formule brute per ogni composto di cui viene misurata la massa esatta e associare le formule brute identificate con le strutture chimiche dei composti ottenuti (sia in modalità MS che MS/MS);

#### **D. Unità di acquisizione dati**

1. La fornitura deve essere inoltre comprensiva di un PC di acquisizione dati per ogni strumento con 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;
  - Mouse & Keyboard;
  - 2 schede ethernet;

#### **E. Formazione del personale e garanzia**

1. A seguito del positivo collaudo del sistema, la ditta aggiudicataria dovrà effettuare un corso di addestramento presso la sede..., per un tempo adeguato al raggiungimento di uno standard operativo minimo e comunque non inferiore a 2 giorni lavorativi on site;
2. Inoltre, deve essere previste un ulteriore sessione training da remoto, principalmente per l'approfondimento della piattaforma SW, della durata indicativa di una ulteriore giornata lavorativa;
3. Garanzia: 12 mesi.