

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 ≤ 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 μ 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 μ L/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 μ 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 μL di H₂O;
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: $\pm 0.05^\circ\text{C}$;
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.