

CAPITOLATO TECNICO

La fornitura ha ad oggetto una strumentazione di ultima generazione e di nuova produzione, interamente controllata da una piattaforma software, e composta da:

- a) Sistema di cromatografia liquida accoppiato ad uno spettrometro di massa q-TOF ad alta risoluzione con mobilità ionica lineare (UHPLC-HR-IMS-MS) e sorgente MALDI integrata per analisi di MALDI-MSI (mass spectrometry imaging)
- b) Softwares per la gestione ed il processamento dei dati sia di MALDI Imaging che di metabolomica
- c) Sprayer per matrice ed enzimi per analisi di MALDI imaging
- d) Sistema liquid handling per la preparazione automatizzata del campione per analisi LC-MSMS
- e) Generatore di azoto necessario al funzionamento dello strumento al punto a)

Caratteristiche tecniche e funzionali dell'oggetto

- A. Spettrometro di massa qTOF con doppia sorgente ESI e MALDI, ad altissima risoluzione con mobilità ionica e cromatografo liquido

Sorgente ionica

- Sorgente electrospray (ESI-/ESI+) e MALDI, con controllo software per selezionare la modalità di ionizzazione senza necessità di rimuovere/posizionare sorgenti differenti
- Sorgente ESI con sprayer posizionato ortogonalmente e ulteriore deviazione degli ioni a 90°C per ridurre al minimo la contaminazione della sorgente, in grado di supportare un flusso di 1 $\mu\text{L}/\text{min}$ – 1 mL/min.
- Sorgente MALDI dotata anche di un secondo laser (MALDI-2) per garantire la ionizzazione delle molecole neutre e la massima sensibilità. Entrambi i laser devono essere perfettamente integrati e gestibili tramite software
- Laser con repetition rate fino a 5 kHz per ionizzazione in MALDI e 1 kHz in MALDI-2
- Risoluzione spaziale fino a 10 μm , velocità di acquisizione 10 pixel/sec

Mobilità ionica

- Possibilità di attivare o disattivare la mobilità ionica direttamente dal software
- Mobilità ionica utilizzabile sia per analisi ESI che MALDI
- Separazione in mobilità ionica con una risoluzione $R \geq 100$ in singola scansione e determinazione riproducibile del CCS con deviazione standard $\leq 0.5\%$ RSD.
- Sensibilità non influenzata dall'attivazione della mobilità ionica
- Sensibilità in mobilità ionica: reserpine 50 fg/ μL < 15% RSD
- Calibrazione di m/z e CCS utilizzando lo stesso calibrante indipendentemente dalla classe di composti da analizzare.

Analizzatore di massa Tempo di Volo (TOF) ad alte prestazioni

- Trasmissione completa attraverso il quadrupolo di ioni fino a 40.000 m/z e selezione degli ioni prima della frammentazione (MS/MS) fino a 3000 m/z.

- L'analizzatore a tempo di volo deve essere mantenuto a temperature costante controllata per garantire una miglior stabilità dell'accuratezza di massa.
- Risoluzione in modalità MS ≥ 40.000 per m/z 1222 in modalità single-reflectron
- Accuratezza in modalità MS e MS/MS: migliore di 0.8 ppm (con calibrazione interna, ESI) e di 2 ppm (con calibrazione esterna, ESI)
- Range dinamico ≥ 5 ordini di grandezza
- Possibilità di creare Extracted ion chromatogram ad elevata risoluzione, con un errore di ± 1.0 mDa per lo screening di matrici complesse

B. Piattaforma Software proprietaria per l'elaborazione degli spettri di massa ESI e MALDI IMAGING

- Software per il processamento dei dati in analisi di metabolomica untargeted in grado di:
 - elaborare dati di lipidomica e metabolomica untarget
 - identificare composti ignoti tramite:
 - Visualizzazione e utilizzo contemporaneo degli spettri acquisiti in modalità positiva e in modalità negativa
 - Calcolo della formula molecolare
 - Valutazione della frammentazione in-silico
 - Calcolo del CSS teorico per strutture lipidiche
 - Permettere analisi statistiche (e.g. PCA, t-Test)
- Software(s) proprietario per la gestione strumentale e l'elaborazione dei dati in analisi di MALDI Imaging. Questo software deve:
 - Essere completamente integrato con quello utilizzato per la gestione strumentale e l'elaborazione degli spettri di massa, garantendo la gestione completa dell'analisi, dall'ottimizzazione del metodo analitico, all'acquisizione dei dati sperimentali alla loro successiva elaborazione
 - Consentire di visualizzare con un codice-colore opportuno la presenza ed intensità di specifiche masse, così da poter ricreare l'immagine della distribuzione spaziale delle stesse sul tessuto analizzato.
 - Dare la possibilità di definire delle liste di masse predefinite da ricercare
 - Analisi statistica dati di imaging (sia supervised che unsupervised)

I dati ottenuti da esperimenti di MALDI-imaging devono poter essere elaborati con entrambi software (metabolomica ed imaging) per garantire un workflow completo

C. Sprayer per matrice ed enzimi per analisi di MALDI imaging

Sistema robotizzato, estremamente riproducibile, per l'applicazione di matrice
Possibilità di preparare fino a 5 vetrini contemporaneamente
Velocità di preparazione di 1 vetrino inferiore ai 15 minuti

D. Sistema liquid handling per la preparazione automatizzata del campione per analisi LC-MSMS

Sistema perfettamente automatizzato per la preparazione del campione, senza necessità di programmazione
In grado di gestire almeno 12 campioni contemporaneamente

Utilizzabile con PreOmics iST Kit in uso in laboratorio

Training

L'offerente dovrà prevedere almeno 3 giornate di training in favore di minimo tre operatori.