

## 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:

- 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)
- Softwares per la gestione ed il processamento dei dati sia di MALDI Imaging che di metabolomica
- Sprayer per matrice ed enzimi per analisi di MALDI imaging
- Sistema liquid handling per la preparazione automatizzata del campione per analisi LC-MSMS
- 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 µL/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  $\geq 40.000$  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  $\geq 5$  ordini di grandezza
- Possibilità di creare Extracted ion chromatogram ad elevata risoluzione, con un errore di  $\pm 1.0$  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.