

SZCZEGÓŁOWY OPIS PRZEDMIOTU ZAMÓWIENIA

Tytuł postępowania:	Spektrometr masowy typu Q-TOF sprzężony z wysokosprawnym chromatografem cieczowym (LC-MS)
Znak sprawy:	ZP-2401-9/25
Zamawiający:	Instytut Chemii Organicznej Polskiej Akademii Nauk
Tryb udzielenia zamówienia:	Przetarg nieograniczony na podstawie art. 132 i nast. ustawy z dnia 11 września 2019 r. Prawo zamówień publicznych (tj. Dz.U. z 2024 poz. 1320 z późn. zm.) o wartości szacunkowej zamówienia przekraczającej 221 000,00 EUR
Główny kod CPV	38433000-9 Spektrometry

Spektrometr masowy typu Q-TOF sprzężony z wysokosprawnym chromatografem cieczowym (LC-MS) to zaawansowane urządzenie analityczne, które łączy możliwości chromatografii cieczowej (LC) z precyzją i szybkością spektrometrii mas typu kwadrupolowo-czasu przelotu (Q-TOF). Umożliwia to analizę złożonych mieszanin związków z wysoką czułością, selektywnością i dokładnością.

Wymagane parametry – opis wymagań:

1. Wysokorozdzielczy spektrometr mas

1.1. LC interfejs oraz Źródło Jonów

- 1) Moduł do jonizacji pod ciśnieniem atmosferycznym (API) z metodami jonizacji:
 - a) rozpylanie w polu elektrycznym (ESI);
 - b) jonizacja chemiczna pod ciśnieniem atmosferycznym (APCI).
- 2) Geometria źródła umożliwiająca stosowanie przepływów do 2000 µl/min (mikrolitrów / minutę) bez używania dodatkowego systemu ogrzewania.
- 3) Moduł źródła umożliwiający zastosowanie podwójnego nastrzyku *electrospray* za pomocą dwóch niezależnych sond ESI: sonda właściwa i sonda do wprowadzania związku referencyjnego - jako standard.
- 4) Ortogonalna lub podwójnie ortogonalna geometria źródła jonów.
- 5) Możliwość jonizacji dodatniej i ujemnej dla technik jonizacji ESI i APCI.
- 6) Stożek wprowadzający omywany strumieniem gazu umożliwiającego proces de-clustering'u jonów tworzących się w źródle pod ciśnieniem atmosferycznym.
- 7) Zastosowanie zaworu odcinającego umożliwiającego demontaż stożka wprowadzającego bez wyłączania systemu próżniowego.
- 8) Elektronicznie kontrolowane objętościowe przepływy gazów desolvacyjnego i omywającego stożek wprowadzający.
- 9) Wszystkie wartości napięć w źródle są komputerowo zadawane i kontrolowane.
- 10) Wymiana stożka, kapilary w sondzie ESI oraz opcjonalnych źródeł jonów odbywa się bez użycia narzędzi.
- 11) Analizator wyposażony w moduł umieszczony pomiędzy źródłem a kwadrupolowym analizatorem mas, który poprzez aktywne usuwanie (odpompowywanie) neutralnych kontaminantów maksymalizuje transmisję jonów ze źródła do analizatorów mas jonowych.
- 12) Spektrometr mas jest wyposażony w zintegrowany i kontrolowany z poziomu komputera automatyczny system zadawania roztworów kalibracyjnego, referencyjnego i badanego poza układem chromatograficznym oraz oprogramowanie umożliwiające:

-
- a) zadawanie roztworów lub rozpuszczalników do spektrometru mas w następujący sposób:
 - z kolumny chromatograficznej;
 - z trzech integralnych zbiorników w bezpośrednim nastrzyku;
 - ze zbiornika w bezpośrednim lub łączonym nastrzyku za kolumną chromatograficzną podczas przebiegu analitycznego;
 - b) automatyczny proces równoczesnego monitoringu oraz kontroli poprawności działania systemu ultraefektywnej chromatografii cieczowej oraz spektrometru mas poprzez automatyczny nastrzyk analitu kontrolnego na kolumnę chromatograficzną - kontrola takich parametrów jak: czas retencji, pole powierzchni, wysokość i szerokość piku (pików) chromatograficznego, stosunek sygnał/szum, dokładność oznaczenia masy - automatyczne ostrzeganie jeśli kontrolowane parametry są poza zadaną tolerancją poprzez generowanie i wydruk raportu;
 - c) monitorowanie parametrów systemu MS: przepływy gazów, napięcia, temperatury, wartości próżni, komunikacji wewnętrznej i kalibracji - automatyczne ostrzeganie, jeśli kontrolowane parametry są poza zadaną tolerancją;
 - d) automatyczny proces kalibracji i kontroli kalibracji kwadrupolowego analizatora mas oraz analizatora Time of Flight (TOF) spektrometru mas oraz informowanie, jeśli kalibracja będzie wymagała sprawdzenia;
 - e) automatyczna optymalizacja warunków źródła dla analizowanego związku lub związków.

1.2. Komora Kolizyjna

- 1) Energia kolizji kontrolowana cyfrowo.
- 2) Programowalne wartości energii kolizji.

1.3. Hybrydowy analizator Kwadrupol-czas przelotu (TOF)

- 1) Kwadrupolowy filtr mas:
 - a) Wysokosprawny kwadrupolowy filtr mas z układami ogniskowania i prefiltrowania strumienia jonów o zakresie do co najmniej 4 000 Da w opcji *resolving mode*;
 - b) Zakres mas dla filtra kwadrupolowego w opcji *non-resolving mode*: nie większy niż od 20 do 16 000 Da;
- 2) Analizator mas *Time of Flight*:
 - a) Geometria ortogonalna (*orthogonal acceleration*);
 - b) Możliwość zbierania pełnych widm spektralnych z szybkością 30 widm/sekundę;
 - c) Zakres analizowanych mas: od 20 m/z do 100 000 m/z;
 - d) Rozdzielczość definiowana jako FWHM (*Full Width Half Maximum* - szerokość piku w połowie wysokości) równa co najmniej 40 000 mierzona dla masy z zakresu 900 - 1 100 Da;
 - e) Napięcia elementów analizatora kontrolowane cyfrowo;
 - f) Dokładność pomiaru mas:
 - ≤ 1 ppm w trybie MS dla masy z zakresu 450-550 Da;
 - ≤ 1 ppm w trybie MS/MS dla masy z zakresu 750-850 Da.

1.4. Detektor

- 1) Ultraszybki powielacz elektronowy z elektroniką typu ADC (*analog-to-digital-converter*);
- 2) Detektor pracuje w trybie rejestracji jonów dodatnich i ujemnych (*positive / negative ion mode*);
- 3) Zakres dynamiczny co najmniej cztery rzędy wielkości z możliwością rozszerzenia do 5 rzędów wielkości w trybie TOF-MRM.

1.5. System Wytwarzania Próżni

- 1) Automatyczny system próżniowy składający się z bezolejowej pompy próżni wstępnej oraz pomp turbomolekularnych chłodzonych powietrzem.
Proces wytwarzania próżni oraz wentylowania układu jest cyfrowo kontrolowany i sterowany komputerowo.

2. System ultraefektywnej chromatografii cieczowej

- 1) Możliwość stosowania do czterech rozpuszczalników.
- 2) Zapewnienie odgazowania próżniowego na wszystkich liniach rozpuszczalników i płukania nastrzyku.
- 3) Kondycjonowanie rozpuszczalników: proces odgazowania próżniowego – pięciokanałowy odgazowywacz próżniowy.
- 4) Ciągła automatyczna kompensacja ściśliwości rozpuszczalników.
- 5) Pompa musi być wyposażona w zintegrowane automatyczne zawory wlotowe.
- 6) Pompa musi mieć możliwość rozpoczęcia gradientu w następujących opcjach:
 - a) w momencie nastrzyku (domyślnie);
 - b) przed nastrzykiem (programowana objętościowo);
 - c) po nastrzyku (opóźnienie gradientu).
- 7) Zakres przepływu operacyjnego: nie gorszy od 0,01 ml/min do 2 ml/min bez podziału przepływu z inkrementem 0,001 ml.
- 8) Precyzja przepływu: $\leq 0,075\%$ RSD; dokładność przepływu: nie gorsza niż $\pm 1\%$.
- 9) Całkowita objętość martwa łącznie z autosamplerem (Dead Volume): nie większa niż 400 μl .
- 10) Maksymalne ciśnienie robocze: nie gorsze niż 15 000 psi (ok. 1035 bar).
- 11) Autosampler przystosowany do jednoczesnej obsługi dwóch wymienionych płytek (niezależnie od typu):
 - a) 96 i 384 studzienkowych;
 - b) 48 pozycyjnych dla wialek 2 mililitrowych;
 - c) 48 pozycyjnych dla wialek do wirówek objętości 0,65 ml;
 - d) 24 pozycyjnych dla wialek do wirówek o objętości 1,5 ml.
- 12) Zakres nastrzykiwanych objętości: 0,1 μl 10 μl w konfiguracji standardowej z możliwością rozszerzenia do 1000 μl przy zastosowaniu opcjonalnych pętli.
- 13) Błąd przenoszenia: nie gorszy niż 0,002 %.
- 14) Termostatowanie prób od 4°C do 40°C programowalne z inkrementem 0,1°C.
- 15) Termostatowanie kolumn: nie gorsze niż od 20°C do 90°C programowalne z inkrementem 0,1°C.
- 16) Zapis historii kolumny przy użyciu mikrochipa.
- 17) System chromatograficzny musi być wyposażony w zintegrowaną programową konsolę diagnostyczną, w której przechowywane i dostępne są 96 godzinne dane z 16 kanałów diagnostycznych.
- 18) Programowa konsola diagnostyczna musi umożliwiać śledzenie takich parametrów jak:
 - a) ciśnienie systemu;
 - b) ciśnienie tłoków pompy;
 - c) ciśnienia w układzie autosamplera;
 - d) temperatury włącznie z temperaturą otoczenia;
 - e) godziny pracy lamp detektorów analogowych o ile mają zastosowanie.
- 19) System chromatograficzny musi być wyposażony w czujniki wycieku z ciągłą 96 godzinną diagnostyką wyświetlaną w oprogramowaniu.

3. Detektor fotodiodowy

- 1) Zakres długości fali nie mniejszy niż 190-800 nm.

- 2) Rozdzielczość spektralna 1,2 nm.
- 3) Liniowość 2 AU.
- 4) Szum nie gorszy niż 15×10^{-6} AU, dryft $\leq 1 \times 10^{-3}$ AU/h/°C.
- 5) Celka o długości drogi optycznej co najmniej 10 mm, objętości nie większej niż 500 nl.
- 6) Maksymalna szybkość próbkowania nie gorsza niż 80 Hz.
- 7) Maksymalne ciśnienie robocze nie mniejsze niż 1000 psi.

4. Oprogramowanie

- 1) System wyposażony w oprogramowanie umożliwiające:
 - a) konfigurację systemu LC-MS;
 - b) tworzenie metod LC - MS definiujące parametry operacyjne dla przebiegów analitycznych;
 - c) uruchamianie analiz LC-MS;
 - d) monitorowanie przebiegów analiz;
 - e) akwizycje danych w następujących trybach:
 - pełny skan spektralny – MS Scan;
 - MS/MS *product ion scanning* – skanowanie produktów (jonów fragmentacyjnych);
 - warunkowe przełączenie trybu MS na MS/MS i odwrotnie;
 - zbieranie danych spektralnych typu *continuum* oraz *centroid*;
 - akwizycja w trybie DDA (*data dependent acquisition*) – automatyczne przełączania pomiędzy trybami MS i MS/MS zależne masy wybranych jonów, zakresów mas jonowych lub stopnia naładowania jonów;
 - jednoczesnego zbierania danych dla niskich i wysokich wartości energii kolizji (DIA – *Data Independent Acquisition*);
 - akwizycja danych w trybie TOF- MRM;
 - f) procesowanie otrzymanych danych.
- 2) Akwizycja i przetwarzanie danych
Jednostka komputerowa dla oprogramowania kontrolno – diagnostycznego oraz akwizycji danych i ich opracowywania umożliwiającego współpracę oferowanego spektrometru mas z systemem ultraefektywnej chromatografii cieczowej:
 - pamięć RAM min. 64 GB;
 - dysk twardy: min. o pojemności 10 TB 7200 RPM;
 - SSD 512 GB;
 - zintegrowana karta LAN Ethernet;
 - system operacyjny: dostosowany wymogami do oferowanego systemu;
 - mysz optyczna, klawiatura;
 - monitor 27”.

5. Generator azotu

- 1) Wydajność - minimum 25 l/min. (litrów na minutę)
- 2) Czystość azotu - minimum 95% bez zanieczyszczeń oleistych.

6. Wyposażenie dodatkowe

- 1) Instrukcja obsługi w języku angielskim.
- 2) Zasilanie awaryjne UPS.
- 3) Dostawa butli z gazem kolizyjnym niezbędnym do pracy spektrometru mas (Argon 10 L, dzierżawa opłacona na rok).

7. Termin, warunki dostawy oraz wymagane szkolenie:

- 1) Wymagany termin dla realizacji niniejszego zamówienia, w tym instalacji, uruchomienia, testowania i przeszkolenia personelu Zamawiającego: w ciągu 8 tygodni od daty zawarcia umowy.
- 2) Wykonawca jest zobowiązany do utylizacji starego sprzętu z siedziby Zamawiającego i instalacji nowego na jego miejsce.
- 3) Po standardowym szkoleniu przeprowadzonym po instalacji aparatu, dwa dodatkowe szkolenia aplikacyjne, każde w wymiarze nie mniejszym niż 10 godzin.

8. Gwarancja:

- 1) Minimalny okres gwarancji: 24 miesiące od daty podpisania bezusterkowego protokołu odbioru.
- 2) W ramach gwarancji Wykonawca pokryje koszty napraw urządzenia, jego wyposażenia i oprogramowania, a także pokryje koszty wymiany uszkodzonych elementów, koszty transportu, ubezpieczenia, koszty robocizny oraz ewentualne koszty podróży i pobytu specjalistów w Polsce.

9. Serwis:

- 1) Czas reakcji serwisu w okresie gwarancyjnym maksymalnie 5 dni roboczych od zgłoszenia.
- 2) Maksymalny czas naprawy: 20 dni roboczych od momentu zgłoszenia; jeśli konieczne będzie sprowadzenie części zamiennych z zagranicy nie dłużej niż 35 dni roboczych.
- 3) Wykonawca zapewni na terenie Polski serwis gwarancyjny oraz serwis pogwarancyjny oraz zapewni dostęp do części zamiennych do dostarczonego urządzenia przez minimum 7 lat po wycofaniu modelu z produkcji.

10. Parametry dodatkowo punktowane (fakultatywne) – kryteria oceny ofert):

- 1) Objętość rozmycia pasma próbek $\leq 12\mu\text{l}$ (mikrolitrów).
- 2) Aktywne podgrzewanie fazy ruchomej przed wejściem na kolumnę.
- 3) Pobór mocy spektrometru mas wraz z pompą próżni wstępnej w czasie standardowej pracy nie większy niż 1 700 Wat.
- 4) Możliwość opcjonalnego wyposażenia spektrometru mas w źródło do desorpcyjnej jonizacji przez rozpylanie w polu elektrycznym (DESI) do bezpośredniego obrazowania.
- 5) Wydłużony okres gwarancji: 36 miesięcy od daty podpisania bezusterkowego protokołu odbioru.