

**Pliego de características técnicas para la adquisición de un sistema completo LC/MS, formado por un Espectrómetro de Masas en tándem, tipo Cuadrupolo-Cuadrupolo-Tiempo de Vuelo (Q/Q/TOF) conectado a un sistema de cromatografía de líquidos, controlado desde una estación de tratamiento de datos con un software completo de trabajo, con las características técnicas mínimas que a continuación se describen.**

El sistema debe ser un espectrómetro de masas en tándem (para MS/MS) de alta resolución, prestaciones, y de fácil manejo, de última generación.

Debe tener capacidad para acoplar fuentes de ionización por Electrospray y APCI. Todas las fuentes deben ser intercambiables en el mismo sistema.

Debe poder operar a alta resolución, alta exactitud y precisión de masa y con un amplio rango dinámico.

Debe permitir llevar a cabo trabajos de identificación y de cuantificación, además de poder llevar a cabo análisis en los que se analicen todos los productos y sub-productos de la misma muestra.

### **Fuente de ionización**

La fuente debe ofrecer configuración del spray ortogonal, con una entrada de gas caliente para mejorar la ionización, incluso a flujos altos de eluyente. El equipo debe presentar un soporte único dual para poder incorporar el estándar interno en continuo a través de un segundo nebulizador.

Debe incluir un Fuente de ionización electrospray (ES)

### **Interfase**

El instrumento debe tener un módulo de interfase de atmósfera-a-vacío con una barrera de "gas de cortina". Este gas (Nitrógeno) debe circular en dirección contraria a la de la entrada de iones al analizador, permite mantener el analizador de masas limpio y evitar la agregación de iones y la transferencia directa de iones sin utilizar calor y con sistema de enfoque muy sencillo.

### **Analizador de masas en tándem tipo Cuadrupolo-Tiempo de Vuelo (QTOF)**

El espectrómetro de masas en tándem (MS/MS) debe tener la siguiente configuración y componentes:

Guía de iones a la entrada, libre de lentes, para incrementar la transmisión de iones al interior de los analizadores cuadrupolares, que permita acelerarlos y separarlos de las posibles moléculas no cargadas que hayan podido pasar a la interfase.

Primer cuadrupolo analizador de masas, de alta transmisión, que pueda analizar así como también diferenciar determinadas masas y hacer la selección de los iones precursores.

Cámara de colisión de aceleración lineal a alta presión. Deberá operar con nitrógeno y debe ser capaz de modificar la energía de colisión entre valores pre-definidos para el mismo espectro de fragmentación.

**El equipo debe ser capaz de trabajar en las siguientes condiciones:**

- Debe ser capaz de adquirir espectros MS con una resolución de 20.000 en modo de trabajo de alta resolución para una m/z superior a 900 uma.
- Debe ser capaz de adquirir como mínimo 25 espectros MS por segundo, 40 espectros de fragmentación (MS/MS) por segundo basados en la información adquirida en el espectro de MS, y 50 espectros MS/MS por segundo en análisis direccionados con un rango de masas comprendidos entre las 5 y 20.000 uma por lo menos.
- Debe mostrar un rango dinámico de 4 órdenes de magnitud en modo MS y MS/MS como mínimo
- La resolución de masa del espectro en MS/MS deberá ser 20.000
- La exactitud de masa a lo largo de todo el espectro de masas deberá ser inferior a 2 ppm con calibración interna e inferior a 3 ppm con calibración externa de masas a lo largo de todo el espectro de masas.

**SOFTWARE Y ORDENADORES**

- El software debe ser capaz de realizar la calibración de los espectros a lo largo del tiempo cromatográfico usando iones internos, e incluir herramientas de validación del trabajo del equipo y de las condiciones experimentales.

- El sistema deberá incluir software que permita realizar cuantificación de datos MRM de alta resolución.

## **CROMATÓGRAFO DE LÍQUIDOS**

El sistema de cromatografía de líquidos ofertado, debe ser de alta presión, con rango de presión mínimo 400 bar, preparado especialmente para su acoplamiento a espectrómetros de masas y deberá estar completamente controlado desde el software del propio espectrómetro de masas, para tener un sencillo y total control del sistema. El acoplamiento y adecuado funcionamiento con el espectrómetro de masas debe estar totalmente garantizado.

## **FORMACIÓN**

La adquisición del equipo deberá incluir los siguientes cursos de formación y entrenamiento:

- Formación básica de uso y de entrenamiento para el mantenimiento preventivo del sistema
- Formación sobre las aplicaciones a desarrollar en el centro de acuerdo con los objetivos del grupo de investigación.
- Estos cursos se realizarán en el laboratorio de destino del equipo una vez el equipo sea instalado, puesto en marcha y verificado.

Valencia, 14 de octubre de 2016



Fdo. JORDI MAÑES VINUESA