

**Referencia: UNEX08-11E-012**

**Título del Proyecto: SISTEMA DE CROMATOGRAFÍA LÍQUIDA DE RESOLUCIÓN ULTRA-RÁPIDA CON DETECTOR DE ESPECTROMETRÍA DE MASAS TIPO CUADRUPOLOS**

Total concedido: 263.736,15 euros

El equipo que se solicita es un sistema de cromatografía líquida de resolución ultra-rápida con detector de espectrometría de masas tipo cuadrupolos. Las **unidades** que deben conformar el equipo solicitado, así como las **características técnicas mínimas** requeridas son las siguientes.

### **1.-CROMATÓGRAFO DE LÍQUIDOS DE RESOLUCIÓN ULTRARRÁPIDA**

Debe contener las siguientes unidades y características:

**1.1.-Cabina/bandeja** para albergar, al menos, 4 botellas de disolvente. Debe ser suficientemente robusta para que en caso de derrame de disolvente, el equipo no se vea afectado.

**1.2-Bomba binaria** con mezcla en alta presión y dos cabezales de doble pistón en serie. Debe tener, al menos, las siguientes características:

- Disponer de, al menos, cuatro canales de bombeo con conmutador integrado, que permita elegir dos de de entre los diferentes disolventes posibles situados en la cabina/bandeja
- Capacidad de trabajar indistintamente con columnas de diferente longitud: 1 a 30 cm, diámetro: 1 a 4,6 mm, y tamaño de partícula: 1,8 a 10  $\mu\text{m}$ . Para ello, debe poder desarrollar una presión de hasta 60 MPa, o superiores.
- Capacidad para trabajar en un rango amplio de flujos a partir de 0,001 ml/min en pasos de 0,001ml/min hasta 5 ml/min en todo el rango de presiones con precisión  $\leq$  0,07% RSD.
- Regulación automática del volumen de embolada.
- Desgasificador por vacío en todos los canales.
- Control directo de la bomba desde el software del equipo.

**1.3.-Bomba isocrática** para sistema de enriquecimiento de muestras, con intervalos de flujo entre 0 y 10 ml/min y válvulas de entrada activadas electrónicamente. Debe poder trabajar en paralelo con el sistema de bomba binaria y debe estar controlada desde el software del equipo de masas.

**1.4.-Inyector automático** con diseño de inyección de flujo continuo. Debe reunir, al menos, las siguientes características:

- Disponer de termostatación de muestras por sistema Peltier, al menos, entre 4 y 40 °C programable en incrementos de 1 °C.
- Volumen de inyección programable entre 0,1 y 40 µl en incrementos de 0,1 µl.
- Precisión < 0,25 % RSD.
- Disponer de sistema de lavado continuo de la jeringa durante el análisis.
- Volumen de retardo hidráulico inferior a 100 µl.
- Bajo efecto memoria.
- Capacidad para manejar viales de diferente volumen. Debe disponer de elevada capacidad para viales de 2 ml ( > 100 ), posibilidad de manejar viales de 6 ml y tubos Eppendorf de hasta 2 ml.
- Trabajar a una presión de hasta 60 MPa, o superiores.
- Control directo del inyector desde el software del equipo. Capacidad de realizar programas de inyector para realizar mezclas, derivatizaciones, diluciones y dosificaciones. En trabajo LC/MS debe permitir el trabajo en modo Análisis de Inyección de Flujo.

**1.5.-Compartimento para columnas.** Debe poseer, al menos, las siguientes características:

- Disponer de termostatación por sistema Peltier, al menos, entre 4 y 100 °C, con una estabilidad de temperatura inferior a  $\pm 0,1$  °C
- Disponer de dos zonas con control de termostatación independiente.
- Capacidad para, al menos, tres columnas de 30 cm de longitud.
- Disponer de sistema de identificación de columnas.
- Disponer de una válvula que permita la adecuada configuración del sistema de enriquecimiento por columna.
- Control directo desde el software del equipo.

**1.6.-Detector de espectrometría de masas** tipo cuadrupolos con la siguiente configuración: Fuente de ionización, cuadrupolo, celda de colisión, detector de tiempo de vuelo. Debe poder trabajar en modo MS y MS/MS, así como tener capacidad de determinar masas exactas. El detector debe ser compacto, totalmente integrado, controlador por ordenador y de altas prestaciones para identificar y cuantificar compuestos. Además, debe reunir las siguientes características mínimas:

- Fuente de ionización: debe ser compatible con las opciones de ionización siguientes: ESI, APCI, APPI, nanoespray y dual ESI-APCI con capacidad de corrección relativa al patrón interno en tiempo real. El equipo se suministrará al menos, con fuentes de ionización ESI y APCI.
- La celda de colisión debe eliminar el efecto memoria y la energía de colisión podrá seleccionarse según la masa.
- Intervalo de masas m/z: hasta 6000 uma en modo MS/MS y hasta 20000 uma en modo MS.
- Exactitud de masas: < 2 ppm en modo MS y < 4 ppm en modo MS/MS al realizar 10 inyecciones iguales consecutivas.
- Resolución: hasta 20000 FWHM.
- Rango dinámico: hasta 5 órdenes de magnitud.
- Sensibilidad: 1 pg de reserpina debe dar un nivel de señal/ruido > 10:1 RMS en modo MS y > 100:1 RMS en modo MS/MS.
- Velocidad de barrido: hasta 20 espectros por s en modo MS y hasta 10 espectros por s en modo MS/MS
- Posibilidad de detección de iones positivos y negativos en un mismo análisis
- Control directo desde el software del equipo. El software debe automatizar la configuración del hardware de MS (resolución y calibración de masas, optimización de la fuente de ionización) y de los diferentes modos de operación (MS Scan, auto MS/MS, ión objetivo MS/MS).
- El control del LC/MS, el control de la secuencia y el cromatograma se visualizarán durante el análisis en tiempo real en una misma pantalla.

**1.7.-Módulo de operación y control.** Para operar y controlar el conjunto del sistema, cromatógrafo, detector y bomba de concentración, debe disponerse de correspondiente equipo informático dotado de un software único.

- Equipo informático. Estará formado por:
  - Workstation con, al menos, las siguientes características: Procesador Intel Pentium Dual Core a 3 GHz 4 MB, memoria RAM 2 GB, capacidad del disco duro 500 GB SATA, DVD Writer 16X DVD /- RW SuperMulti SATA. Debe disponer de sistema de back-up de recomposición rápida del disco duro en caso de fallo del mismo.
  - Monitor TFT de 22", teclado y ratón óptico.
  - Impresora láser con, al menos, las siguientes características: capacidad de impresión hasta 20 ppm, calidad de impresión hasta 1200 x 1200 ppp, capacidad de alimentación hasta 300 hojas; impresión a doble cara, encendido instantáneo.
- Software instalado: Sistema operativo Windows, Microsoft Office 7, Acrobat Reader y antivirus. Software único de operación y control de todo el sistema LC/MS (ver apartado siguiente).

## **2.-SOFTWARE EDITOR DE DATOS.**

Un software único debe controlar y gestionar el conjunto del sistema de cromatografía líquida con detector de masas suministrado. Asimismo debe poder proporcionar espectros, cromatogramas e informes exportables en hojas de cálculo tipo Excel.

### **2.1.-Otro software relacionado con la interpretación y discusión de los resultados.**

Debe incluirse, al menos, el siguiente software adicional para la interpretación y discusión de los resultados:

- Software para la confirmación de la fórmula molecular del mayor número de compuestos y sus metabolitos posibles en una muestra (aunque co-eluyan).
- Software para la generación de fórmula molecular para identificar compuestos únicos en matrices complejas.
- Software con algoritmos de deconvolución y determinación de masa exacta de proteínas intactas.
- Software de cuantificación absoluta o relativa de compuestos puros, impurezas y compuestos de degradación.

## **3.-GENERADOR DE NITRÓGENO.**

Capaz de generar nitrógeno con una pureza de al menos 99% con un caudal de 30 l/min. Debe ser capaz de proporcionar caudales mayores sin que la pureza en nitrógeno baje del 98%. El generador deberá estar alimentado por dos compresores de aire incluidos.

## **4.-OTRO MATERIAL A SUMINISTRAR**

Se deben suministrar columnas de diferentes características para poder realizar los diferentes tipos de análisis de LC/MS. Se valorará el suministro de material complementario necesario para el correcto funcionamiento del equipo, tal como frascos para disolventes, viales, etc.

## **5.-GARANTÍA.**

1 año.

## **6.-CURSOS DE FORMACIÓN.**

Tras la instalación del equipo, se impartirán sendos cursos de formación. Uno dirigido al personal encargado de la manipulación directa del equipo, encaminado a adiestrarlo en su puesta en marcha, manejo, aplicaciones, conformación de informes, etc. Otro dirigido a los investigadores usuarios del equipo, para aprender a interpretar los espectros y datos proporcionados por el personal encargado de los análisis.