

Expte. S.017/16.- Pliego de prescripciones técnicas de un espectrómetro de Masas en tándem Cuadrupolo-Cuadrupolo- acoplado a cromatografía líquida

El sistema debe ser un espectrómetro de masas en tándem (para MS/MS) de alta resolución y prestaciones, compacto, de sobremesa, y de fácil manejo. Debe tener capacidad para acoplar fuentes de ionización por electrospray, APCI, Photospray, como Nanospray.

Sistema LC/MS/MS triple cuadrupolo que permita trabajar en modo triple cuadrupolo (con todos los tipos de scan característicos de éste, altas prestaciones para la cuantificación, gran selectividad, etc.),

El sistema debe ser compatible con Cromatógrafos de líquidos de diversas marcas, (y específicamente compatible con un sistema de HPLC ya existente en el centro de destino: Hitachi LaChrom Ultra) controlándolos a través del software del espectrómetro de masas. En el precio se debe incluir la instalación, el acoplamiento con el HPLC y el sistema generador de nitrógeno.

1- Espectrómetro de masas

Interfase: La interfase de vacío debe mantener el analizador de masas limpio y evitar la agregación de iones y la transferencia directa de iones sin utilizar calor usando un sistema de enfoque sencillo.

Fuente de ionización: El equipo debe suministrarse con una única fuente de geometría de flujo con spray ortogonal directa sin ángulos con capacidad ESI y APCI intercambiable. La fuente debe poseer al menos tres sistemas de calentamiento autolimpiables.

La posición del spray se deberá poder ajustar vertical y horizontalmente. La fuente con ionización tipo electrospray, debe permitir aceptar flujos más elevados que las fuentes corrientes (entre 5 y 3000 ul/min) sin necesidad de realizar derivación de flujo.

La Fuente en modo ionización química a presión atmosférica (APCI) debe poseer un gas nebulizador y la temperatura de la sonda debe ser capaz de variarse desde el software hasta al menos 500°C. Asimismo el flujo de trabajo debe estar entre 50 y 3000 ul/min sin derivación de flujo.

El cambio entre los dos modos de ionización debe ser sencillo, colocando la sonda adecuada (sin extraer la carcasa) y el equipo y el software automáticamente deben detectar cual está en posición.

Analizador de masas en tándem tipo triple Cuadrupolo: El espectrómetro de masas en tándem (MS/MS) debe tener la siguiente configuración y partes:

Módulo de entrada iónica directa, con orificio de entrada de iones desde presión atmosférica a vacío, con gas barrera contracorriente, seguido por un cuadrupolo de guía de iones sin capacidad de filtro de masas.

Q1 = Primer analizador de masas, que puede analizar así como también seleccionar determinadas masas.

Q2 = Cámara de colisión de alta presión con diseño cruzado de aceleración de iones y diferencias de energía potencial en la entrada y salida de la celda de colisión..

Q3 = Analizador de masas cuadrupolar

Especificaciones:

Rango de masas: Este sistema debe ser capaz de operar en el rango de $m/z = 5-3000$.

Velocidad de escaneo: Hasta 24000 Da/sec

Rango Dinámico: 5 órdenes de magnitud

Sensibilidad: 200 fgr en columna deben producir una Señal Ruido superior a 1200 con un CV menor de un 5%

Modos de escaneo: Debe poder operar en modo "Full scan", ion seleccionado tanto en primer como en tercer cuadrupolo, ion producto, pérdida de neutros, MRM y MRM programado.

Detector: Detector de díodos continuos (CEM) operado en modo de pulsos. Capacidad de detección de iones positivos y negativos. El enfoque de iones debe estar totalmente controlado por ordenador, con posibilidad de cambiar la polaridad y alternar polaridad entre barridos y cambiar control manual.

2- Sistema informático.

Software: Se debe incluir paquete informático completo de última generación para el análisis e interpretación de espectros, incluyendo el software necesario para adquirir, procesar, analizar, mostrar, editar e imprimir espectros de masas, de fragmentación y otros datos, así como la búsqueda en bibliotecas de fragmentos y genómicas disponibles en internet. El sistema de adquisición y procesamiento de datos debe estar basado en Windows para PC, con interfase gráfica multiventana para una fácil comparación y análisis de datos.

Paquete de software completo que permita la operación con iones positivos y negativos, y trabajar en los distintos modos. Este software debe tener distintos módulos con capacidad para las siguientes operaciones:

- Configurar el sistema con distintos niveles de seguridad y acceso.
- Optimizar de forma automática los métodos de análisis para asegurar el mejor rendimiento y prestaciones del sistema, con todas las fuentes de ionización.
- Una rápida adquisición de datos para aumentar productividad.
- Explorar los resultados de forma rápida, fácil y a través de todos los pasos realizados.

- Cuantificar de modo preciso y reproducible, con curvas de calibrado y patrones internos, los analitos de interés.

- Capacidad de realizar MRM programado (sMRM) consiguiendo como mínimo 300 MRM por segmento cromatográfico hasta 1000 por segmento.

- Capacidad de adquirir datos dependientes, conmutando automáticamente el modo MS/MS durante la adquisición basándose en datos adquiridos en modo MS en el barrido previo.

Hardware: Ordenador de control del sistema constituido al menos por:

Dell, Procesador a , 2,66 GHZ 2 GB RAM, discos duros de 2x320GB con configuración RAID 1.
Con DVD RW (CD RW)

Ratón y teclado

Monitor, pantalla plana color 19"

3- Sistema generador de nitrógeno:

Sistema independiente, móvil, sin compresor externo, compatible con el detector. Los requerimientos mínimos son:

Nitrógeno 12 L/min @ 5.52 bar.

Fuente de gas (aire) 24 L/min @ 7.58 bar.

Temperatura de operación: 5°C - 35°C

Humedad relativa máxima: 80%

Partículas < 0.01µm

Ftalatos: Ausentes

Líquidos en suspensión: Ausentes

Ruido 54 dB(A) @ 1m

Conexión eléctrica: 230v 50/60Hz 6.0A

Dimensiones: 60 x 75 x 71.2