

## Allegato 1 - Caratteristiche Tecniche

Sono descritte di seguito le caratteristiche tecniche minime del sistema UHPLC/HRMS oggetto di interesse.

### A. Spettrometro di Massa in Alta Risoluzione

1. Spettrometro di Massa da banco in alta risoluzione basato su tecnologia quadrupolo/detector ad alta risoluzione che lavori in trasformata di Fourier.
2. Lo spettrometro di Massa deve essere in grado di separare gli ioni di diverso valore di massa/carica senza l'utilizzo di campi magnetici generati da magneti a superconduzione.
3. Accuratezza di massa:
  - < 1 ppm (con calibrazione interna)
  - < 3 ppm (con calibrazione esterna)
4. Risoluzione (R):
  - 120.000 misurata a  $m/z$  200;
  - per ogni modalità di scansione ed in entrambe le polarità.
5. Quadrupolo con capacità di isolare i precursori con banda passante fino a 0,4 Da.
6. Dotato di cella di collisione per la frammentazione MS/MS.
7. Interfaccia "Elettrospray" riscaldata (ESI), in grado di operare in ionizzazione positiva e negativa con flussi massimi compresi tra 1 e 1000  $\mu\text{L}/\text{min}$ , senza necessità di ripartizione.
8. Interfaccia adatta ad operare a nano e micro flussi.
9. Deve permettere acquisizioni in "Full Scan" ad alta risoluzione in un range di massa compreso tra 40 e 3.000 amu.
10. Modalità di acquisizione MS/MS in alta risoluzione.
11. Acquisizione di dati in modalità contemporanea "Full Scan-MS/MS".
12. Modalità di acquisizione di spettri SIM (Single Ion Monitoring) e MS/MS in

14. "Multiplexing", tale che più ioni precursori (almeno 20) possano essere raccolti e preselezionati per il rilevamento in alta risoluzione, con riduzione del tempo di ciclo analitico e incremento del numero di misurazioni all'interno del picco cromatografico.
15. Modalità di acquisizione di tipo "Data Dependent Scan".
16. Switching di polarità: il sistema deve eseguire un ciclo completo in Full Scan (una scansione completa sia in polarità positiva che negativa) in un tempo  $\leq 0,720$  secondi ad una Risoluzione fissata e pari a 60.000 FWHM.
17. Presenza di capillare per il trasferimento degli ioni in massa removibile senza interruzione del vuoto.
18. Deve essere dotato di sistema di infusione diretta a mezzo siringa;
19. Dotato di sistema di insonorizzazione della pompa rotativa.

### **C. Software**

1. La piattaforma software ed il sistema operativo devono garantire la gestione ed il controllo diretto dell'intero sistema;
2. Devono essere forniti tutti i software necessari alla migliore gestione della strumentazione oggetto dell'offerta: dal tuning dello spettrometro di massa, all'elaborazione dei dati qualitativi e quantitativi, dalla gestione dei dati su fogli elettronici (excel), alla personalizzazione dei report di stampa;
3. Devono essere presenti algoritmi in grado di ottenere le formule brute per ogni composto di cui viene misurata la massa esatta e associare le formule brute identificate con le strutture chimiche dei composti ottenuti (sia in modalità MS che MS/MS);
4. Software in grado di effettuare la ricerca di masse esatte e riconoscimento di spettri MS2 nell'ambito della metabolomica e in grado di collegarsi a banche dati online (ChemSpider o similari). Il software deve inoltre effettuare una



analisi. Differenziale con confronto campioni con  $n > 2$ . Il medesimo software deve essere in grado di verificare la frammentazione in-silico per spettri di frammentazione.

#### **D. Cromatografo Liquido Ad Alte Prestazioni (UHPLC)**

1. Il cromatografo deve essere dotato di sistema di pompaggio di tipo binario che includa un degaser a membrana senza necessità di gas ausiliari. Il sistema di pompaggio deve avere un volume morto inferiore a 25 nL.
2. Il sistema di pompaggio deve operare con un intervallo di flussi compreso tra 1 nL/min e 100  $\mu$ L/min con incrementi di 1 nL/min.
3. Il cromatografo deve poter raggiungere una pressione massima di esercizio di almeno 1.500 bar.
4. Autocampionatore termostato tra 4 e 40 °C in grado di iniettare volumi di campione compresi tra 0,01  $\mu$ L e 25  $\mu$ L con incrementi di 0,01  $\mu$ L. L'autocampionatore deve permettere l'alloggiamento di almeno 200 vials da 1,5/2mL.
5. Il cromatografo deve gestire iniezioni di tipo "*direct injection*" e "*trap & elute*". Il passaggio da una modalità all'altra deve essere eseguibile senza apportare modifiche alla strumentazione.

#### **E. Unità di acquisizione dati**

1. Personal computer di ultima generazione con caratteristiche tali da supportare i software di gestione, completo di sistema operativo e monitor.
2. Garanzia: 12 mesi dalla data di effettuazione del collaudo.