

## ESPECIFICACIONES TÉCNICAS PARA LA ADQUISICIÓN DE UN ESPECTRÓMETRO DE ALTA RESOLUCIÓN Q-TOF CON FUENTES A PRESIÓN ATMOSFÉRICA DE ELECTROSPRAY, APci E INTRODUCCIÓN DIRECTA

A continuación se describen las prestaciones indispensables que ha de cumplir el nuevo espectrómetro para dar respuesta a la actual demanda y a las nuevas áreas de desarrollo del laboratorio de Espectrometría de Masas del Servicio Interdepartamental de Investigación

### ESPECTRÓMETRO DE MASAS DE CONFIGURACIÓN CUADRUPOLO-TIEMPO DE VUELO (QTOF)

- Analizador de masas de tipo Cuadrupolo Tiempo de Vuelo (Q-TOF) con máxima sensibilidad a la vez que máxima resolución a velocidades de UHPLC tanto en modo MS como en MS/MS.
- Amplio rango lineal ( $>10^5$ ) tanto dentro de un mismo espectro como entre espectros de distintos compuestos en un mismo análisis
- Selección automática de iones precursores para análisis MS/MS.
- Rango de masas real: 20-40,000 m/z
- Resolución de masas de 80000 (FSR) ("Full Sensitivity Resolution") a máxima resolución en el entorno de 1000 m/z y la resolución de masas debe ser estable a lo largo del rango de masas del analizador
- Para trabajar sin pérdidas de sensibilidad, la resolución se debe alcanzar mediante un solo paso de iones a través del reflector
- Exactitud de masas ha de ser en el rango de las ppb RMS (con calibración interna), mejor de 2 ppm RMS (con calibración externa) e independiente de la concentración de la muestra
- Máxima estabilidad de masas exactas: se requiere una estabilidad de +/- 0,5 a 1,0 mDa para obtener cromatogramas con iones extraídos con ese filtro de masa
- Calibración única para trabajo tanto en MS como en MS/MS con posibilidad de elegir cualquier patrón de calibración por parte del usuario
- Sensibilidad MS Full Scan: que 1 pg. de Reserpina (ión 609 m/z) proporcione una relación S/N > 100:1 RMS a máxima resolución del equipo y que 100 fg de Reserpina ofrezcan una S/N >100:1 RMS
- Sensibilidad MS/MS Full Scan: La señal obtenida con la medida en el rango de los fmol de Glu-Fibrinopeptido B, ha de ser mejor que 1000 cuentas en el ion más intenso de la secuencia y' del espectro MS/MS del ion precursor de doble carga y con una S/N mejor de 50:1.
- Velocidad de adquisición: hasta 50 Hz (50 espectros/seg.) tanto en MS como en MS/MS.
- Digitalizador: 5GHz (señal cada 0,5 ns) con tecnología ADC a 50Gbit/seg
- Acelerador ortogonal para focalización y extracción de iones con ultra-precisión con repetición de pulsos de iones a 20 KHz
- Estabilidad de relación isotópica en todo el rango que permita la identificación de compuestos en tres dimensiones con algoritmos que utilicen masa exacta, Perfil isotópico y fragmentación MS/MS.
- Determinación inequívoca de la fórmula molecular a niveles de confianza de sub-ppm.
- Analizador cuadrupolar previo, con Q1 hiperbólico, celda de colisión hexapolar para fragmentación CID de precursores. Rango de masas hasta 40,000 m/z con aislamiento de iones precursores hasta 3,000 m/z
- Debe incluir Bomba de jeringa para infusión de muestra
- Posibilidad de incorporar otras fuentes de ionización a presión atmosférica: APPI, nano-ESI...
- Posibilidad de conexión a RMN para sistema LC-QTOF-RMN

## FUENTES DE IONIZACIÓN:

- **Fuente de ionización Electrospray (ESI)**
  - Fuente de alta sensibilidad con focalización de iones para una alta eficacia
  - Aguja de nebulización con potencial a tierra para una mejor introducción de muestra y seguridad de operación, permitiendo el acoplamiento directo de UHPLC, HPLC y Electroforesis capilar (CE)
  - Rango de flujos: desde 1µL/min. hasta 1mL/min
  - Capilar de entrada de vidrio, de diámetro ancho, especialmente inerte y con recubrimiento de Ni de alta resistividad (1GΩ) para aislamiento electrostático
  - Posibilidad de trabajar sin aplicar temperatura en la fuente para análisis de compuestos térmicamente lábiles
- **Fuente de ionización APci (intercambiable)**
  - Superficie de la fuente recubierta
  - Conmutación sencilla entre ESI y APCI sin ruptura de vacío
- **sonda directa de sólidos acoplable a la fuente APci**
  - Introducción directa de sólidos o dispersiones mediante un capilar de vidrio

## SISTEMA DE UHPLC DE GRADIENTES A ALTA PRESION

- Sistema de gradientes binarios en alta presión de mínimo volumen muerto
- Rangos de flujo entre 0,01 y 2 mL/min
- Rango de presiones hasta 18,000 psi a 1mL/min
- Mezcla a alta presión, de 50 uL
- Inyector automático de loop fijo, con modos de inyección loop parcial, loop completo y sobrellenado de la aguja
- Inyector automático compatible con viales y placas de hasta 384
- Compartimento de muestras termostatzado de 4 a 40°C
- Horno de columnas
- Control totalmente integrado en el control del espectrómetro Q-TOF

## ESTACIONES DE CONTROL Y PROCESAMIENTO DE DATOS

- **Estación de datos** tipo HP z400 o equivalente, para el control del Espectrómetro y la adquisición de datos, con las siguientes características:
  - Intel Core 2 Duo 3,16 GHz, 12GB RAM, 2 TB HD, pantalla plana 24", unidad DVD-ROM, Windows 7/64 bits, conexión Ethernet para asistencia remota
- **Paquete completo de software** con diseño modular para el control total del equipo, procesamiento y exportación de datos, compuesto por:
  - Módulo para el control total del sistema de UHPLC. Debe poder controlar los principales HPLC del mercado e incluirá el que controla el sistema presente actualmente en el laboratorio (Agilent 1100)
  - Módulo de Control completo de todos los parámetros de adquisición del espectrómetro de masas tanto a nivel de usuario básico como experto
  - Módulo de procesamiento, revisión, manipulación y exportación de datos
  - Debe permitir la generación de la estructura de la molécula a partir de la fórmula molecular
  - Deconvolución espectral para iones carga múltiple
  - Búsqueda automática de espectros MS, MS/MS y MSn en bibliotecas de espectros, con avanzados algoritmos de búsqueda.
  - Sistema de autodiagnóstico y diagnóstico remoto via Webex

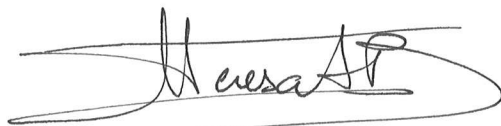
- **Segunda estación de datos** de tipo HP z400 o equivalente, para procesamiento de resultados, con las siguientes características:
  - Intel Core 2 Duo 3,16 GHz, 12GB RAM, 2 TB HD, pantalla plana 24", unidad DVD-ROM, Windows 7/64 bits, conexión Ethernet para asistencia remota
  - Software de análisis estadístico de datos

## FORMACIÓN Y PUESTA EN MARCHA

El suministrador se debe comprometer a la puesta en marcha de los sistemas tras su instalación, dicha puesta en marcha debe incluir:

- Garantía de dos años para el suministro
- Instalación y puesta a punto a ejecutar por personal técnico especializado de la compañía suministradora.
- La instalación y formación posterior debe realizarse en castellano
- Apoyo en los requisitos de instalación necesarios para el funcionamiento del equipo
- Cursos de formación sobre el sistema, software y mantenimiento preventivo a impartir a los responsables de la técnica en el laboratorio. Estos cursos se desarrollarán "in situ" quedando supeditada la duración de los mismos a las necesidades del Laboratorio.
- La puesta en marcha deberá llevarse a cabo íntegramente por especialistas técnicos y del laboratorio de aplicaciones de la empresa suministradora
- Se deberán especificar los compromisos en cuanto a mantenimiento posterior y soporte de aplicaciones a lo largo de la vida del equipo

Madrid, 18 de julio de 2016



Dra. Maite Alonso

Responsable Técnico del laboratorio de Espectrometría de Masas  
Servicio Interdepartamental de Investigación (UAM)

Esta Gerencia, por delegación del Sr. Rector de esta Universidad, de fecha 10-04-2015 (BOCM de 17-04-2015) ha resuelto aprobar el presente Pliego de Prescripciones Técnicas.

Madrid, 27-07-2016  
EL GERENTE,

