

Příloha č. 4 – Technická specifikace

Obecné požadavky pro přístroj:

Vysokoúčinný kapalinový chromatograf s hmotnostním spektrometrem kvadrupól-time-of-flight, včetně softwaru a příslušenství.

Přístroj bude využíván pro identifikaci stresových markerů stromů a dále pro stanovení sekundárních metabolitů chránících strom před stresovými faktory. Součástí dodávky budou také softwarové nástroje s knihovny pro zpracování souborů dat. Softwarové produkty musí být kompatibilní s operačním systémem Windows 10.

Předmětem plnění je dodávka chromatografu vč. SW v požadovaném technickém provedení, všech součástí, příslušenství a dokladů (kompletní technická dokumentace, uživatelská a instalační příručka spolu s bezpečnostními a provozními předpisy v anglickém či českém jazyce, záruční list), nezbytných k řádnému provozu.

Požadavky na technické provedení:

1. Vysokoúčinná kapalinová chromatografie

1.1. Binární vysokotlaké čerpadlo pro chromatografii

- tlakový limit min. 1200 bar
- selekční ventil pro výběr až ze 4 zásobníků mobilní fáze
- možnost průtoku alespoň v rozsahu 0,01 ml/min až 2 ml/min při současném dosažení tlaku min. 1200 bar
- vakuový degasser
- mrtvý objem s mixérem max. 50 µl
- senzor úniku mobilní fáze

1.2. Autosampler

- možnost objemu nástřiku v rozsahu alespoň 0,1 – 20 µl bez nutnosti hardwarového zásahu (výměna hlavy, smyčky, apod.)
- tlaková odolnost min. do 1200 bar
- jehla je součástí vysokotlaké cesty (tzv. "flow through" konstrukce)
- programování dávkovacího cyklu, ředění, mísení přímo v dávkovací smyčce
- minimálně 100 pozic pro vialky objemu 1,5-2 ml
- přenos vzorku ("carry over") < 0,005 % pro chlorhexidin
- termostatování vzorků v rozsahu alespoň 5 °C až 40°C

1.3. Termostat kolon

- možnost termostatování kolon alespoň v rozsahu laboratorní teplota až 80°C (*minimální teplota = laboratorní teplota*)
- kapacita alespoň 2 ks kolon délky minimálně 30 cm
- termostatování bez nuceného oběhu vzduchu

2. Tandemový hmotnostní spektrometr typu kvadrupól – time-of-flight (Q-TOF) s vysokým rozlišením a měřením přesné hmoty

- ionizace elektrosprejem v ortogonálním uspořádání ke vstupu do MS s fokusací oblaku iontů přehřátým koaxiálním proudem dusíku

- oddělená ionizační sonda pro referenci a pro efluent z kolony
- dusík jako jediný sprejovací a sušící plyn pro iontový zdroj bez nutnosti připojení dalšího plynu k přístroji
- přístroj musí být možno umístit na laboratorní stůl (benchtop model), maximální výška 2 m
- citlivost pro MS režim: 1 pg nástřiku reserpinu (m/z 609.2807) na kolonu v ESI+ módu dosáhne poměr signálu k šumu minimálně 500:1, vyhodnoceno jako šum $1 \times \text{RMS} - \text{root mean square}$
- přesnost určení hmoty < 1 ppm RMS v MS módu a < 2 ppm RMS v MS/MS módu
- rozlišovací schopnost analyzátoru alespoň 60 000 FWHM na m/z < 3000 při současném dosažení specifikace minimální citlivosti
- rozlišovací schopnost analyzátoru alespoň 30 000 FWHM na m/z < 130 při současném dosažení specifikace minimální citlivosti
- lineární dynamický rozsah detektoru (ve spektru) alespoň 5 řádů
- převodník dat na principu Analog-to-digital (ADC)
- kalibrace osy m/z v každém MS spektru
- automatická optimalizace parametrů hmotnostního spektrometru s možností nastavení podmínek pro nestabilní ionty a automatická hmotnostní kalibrace
- rychlost sběru dat v MS režimu alespoň 50 spekter/s při současném splnění parametrů minimálního rozlišení a citlivosti
- režimy měření:
 - (i) měření přesné hmoty bez fragmentace s kvadrupólem průchozím pro všechny ionty (plná MS spektra)
 - (ii) měření přesné hmoty produktů v režimu MS/MS, se selektivním prekurzorem pro MS/MS pomocí kvadrupólu (MS/MS)
 - (iii) měření přesné hmoty produktů v režimu MS/MS s automatickou selekcí prekurzoru v kvadrupólu (auto MS/MS)
 - (iv) měření přesné hmoty produktů v režimu MS/MS bez selekce prekurzoru, tedy s kvadrupólem průchozím pro všechny ionty
 - (v) měření přesné hmoty produktů po fragmentaci prekurzorů vybraných v kvadrupólu v segmentovaném režimu (tedy postupně po definovaných úsecích m/z)
- Ovládání všech modulů systému z jedné datastanice a jednotného software

3. Software pro řízení LC/MS QTOF sestavy, sběr dat, kvalitativní a kvantitativní vyhodnocení dat

- min. 1 licence řídicího software a min. 2 licence software pro vyhodnocení dat, časově neomezené
- řízení všech modulů LC/MS QTOF sestavy
- extrakce molekulových signálů a jejich „alignment“
- extrakce molekulových signálů napříč sadou vzorků s rekurzní extrakcí pro eliminaci falešně pozitivních a falešně negativních molekulových signálů
- možnost revize výsledků extrakce molekulových signálů
- korekce posunu retenčních časů v sekvenci
- výpočet sumárního vzorce iontu využívající kombinaci přesné hmoty molekulového iontu i izotopů, poměr izotopických hmot a jejich odstup (spacing)
- korelace změřeného MS/MS spektra se strukturálními vzorci z knihoven i z internetu (www.chemspider.com apod.)
- možnost screeningu vzorku na základě porovnání s databází a s knihovnou s využitím MS spektra a MS/MS spektra včetně poměrů fragmentů pro maximální jistotu identifikace

4. Softwarový balík pro metabolomickou analýzu

4.1. Databáze a knihovna spekter METLIN

- obsahující alespoň 70 000 endogenních metabolitů a látek relevantních pro živé organismy
- možnost „offline“ práce s touto databází, tedy její umístění na disku PC a algoritmus využívající tuto lokální databázi.
- pro každou látku musí být obsažena informace o struktuře sloučeniny, jejím sumárním vzorci, přesné hmotě neutrální molekuly, CAS čísla
- knihovna spekter musí zahrnovat MS/MS spektrum pro alespoň 9 000 látek naměřené na daném typu hmotnostního spektrometru při alespoň třech kolizních energiích a revidované (korigované na teoretickou hmotu) přesné hmoty fragmentů
- možnost uživatelské editace databáze a knihovny, přidávání nových látek, spekter, vytváření dílčích databází.

4.2. Software pro diferenční a statistickou analýzu

- alignment molekulových signálů podle retenčního času a m/z, filtraci látek podle odezvy, frekvence výskytu látek napříč vzorky, variability, statistickou analýzu (t-test, ANOVA, PCA, analýza klastrů, korelační analýza) a tvorbu modelů pro klasifikaci vzorků

5. Řídící a vyhodnocovací PC

• PC stanice pro řízení LC-MS QTOF systému, sběr dat a vyhodnocení dat s monitorem

- Procesor: výkon min. 14 000 bodů PassMark
 - Pevný disk: min 4 x 6 TB min 7200 RPM SATA
 - Chipset: chipset umožňující funkce vzdálené správy a sledování počítače nezávisle na stavu či přítomnosti operačního systému, vzdálené zapnutí/vypnutí počítače a podpora hardwarové virtualizace
 - Operační paměť: min. 64GB DDR4
 - Grafická karta: min. 900 bodů PassMark
 - Síťová karta: min. 1x integrovaná síťová karta umožňující připojení rychlostí min. 1 Gbps + min. 1x 10-Gigabitový síťový adaptér se dvěma SFP+ sloty pro instalaci modulů, FCoE encapsulation, IEEE802.1AE, IEEE1588, 802.1D, 802.1p, 802.3ad, 802.1Q vyžadujeme kompatibilitu s originálními HPE SFP+ moduly (10G SFP+ LC LR Tranceiver 10km)
 - Zvuková karta: integrovaná zvuková karta postačující pro běžné ozvučení počítače
 - Optická mechanika: jednotka DVD-RW SATA
 - Příslušenství: čtečka paměťových karet, klávesnice pro Windows CZ s numerickou částí, optická nebo laserová myš s 2 tlačítka a kolečkem (notebooková velikost myši je nepřijatelná)
 - Porty: min. 4x USB 3.0, min. 2x SATA, min. 1x sériový port, min. 2x DisplayPort nebo min. 2x HDMI, 1x zvukový vstup, 1x zvukový výstup, 1x RJ-45
 - Operační systém: běžný kancelářský OS
 - Typ skříně: mini tower
- monitor:**
- Typ panelu: IPS
 - Úhlopříčka: 23.5"-26"
 - Rychlost odezvy: maximálně 5 ms
 - Statický kontrast: minimálně 1000:1
 - Obnovovací frekvence: minimálně 60 Hz
 - Jas: minimálně 250 cd/m²
 - Nativní rozlišení: min. 1920 x 1080 px (Full HD)
 - Poměr stran: Širokoúhlý 16:9
 - Povrch displeje: Matný nebo antireflexní
 - Ovládání: Tlačítka na obrazovce
 - Konektivita minimální požadavky: min. 1x DisplayPort nebo min. 1x HDMI, min.1x USB 2.0 nebo min 1x USB 3.0
 - Otáčení a naklápění obrazovky: ANO

Výškově stavitelný stojan: ANO
Energetická efektivita: Splňuje normy ENERGY STAR® a EPEAT® Gold

6. Generátor dusíku

- S kapacitou a kvalitou výstupního dusíku odpovídající požadavkům sestavy

7. Záložní zdroj napětí

- Pro udržení sestavy v chodu po dobu alespoň 10 min.

8. Balík spotřebního materiálu

- Rozpouštědla – kvalita pro LC/MS: **methanol min. 20 l, acetonitril min. 10 l, voda min. 20 l**
- Aditiva do mobilní fáze v LC/MS kvalitě: **mravenčan amonný min. 100 g, kyselina mravenčí min. 100g**
- Šroubovací vialky čiré 2 ml - **min. 10 000 ks**
- Šroubovací vialky tmavé 2 ml – min. **5 000 ks**
- Šroubovací víčka na vialky včetně septa (PTFE/silicone) – min. **20 000 ks**
- Inline filtr (pro zapojení mezi autosampler a kolonu), 0,3 um velikost částic – min. **1 ks**
- Náhradní frity pro inline filtr, 0,3 um velikost částic – **min. 5 ks**
- inserty do vialek 200 ul s pružinkou - min. **500 ks**
- inserty do vialek bez pružinky 250 ul –min. **500 ks**
- zásobník na 2 ml vialky min 50 pozic - min. **10 ks**
- **3 ks** automatických pipet pro rozsah pipetovaných objemů 10 uL – 5 ml
- Špičky k automatickým pipetám odpovídající velikosti – min. **4000 ks** pro každou pipetu, celkem 12 000 ks
- Stříkačkové filtry 13 mm, velikost pórů 0,22 um, materiál PTFE nebo PVDF nebo PES – min. **3000 ks**
- Centrifugační zkumavky kónické PP 15 ml – min. **600 ks**
- Jednorázové stříkačky PE pro filtraci vzorků 2 ml – min. **1000 ks**
- Sada standardů v minimálním množství (rutin (50 mg); (+)-catechin (10 mg), quercetin dihydrate (20 mg); ferulic acid (1g), caffeic acid (20 mg), gallic acid (20 mg); chlorogenic acid (20 mg); 2-coumaric acid (1 g), 3-coumaric acid (1 g); 4-coumaric acid (1 g); syringic acid (1 g); salicylic acid (1 g))