

Název přístroje:

Komprehenzivní dvoudimenzionální plynový chromatograf s hmotnostním spektrometrem pro separaci a identifikaci neznámých složek (dále jen „GCxGC MS“)

Použití přístroje:

- Separace a identifikace těkavých organických látek z komplexních přírodních vzorků se složitými matricemi.
- Především terpenů a oxidovaných terpenů ze dřeva, uhlovodíků a dalších zplynitelných (těkavých) lipidů z brouků, či např. aromatů a dalších těkavých látek emitovaných houbami či mikroorganismy. U velkého množství vzorků při porovnávacích studiích je nezbytný automatizovaný sběr těchto těkavých látek rovnou z headspace prostředí a termální desorpce těkavých látek ze sorbentu, či přímo z biologického materiálu.

GCxGC MS je požadován pro výzkum chemického složení přírodních látek umožňující identifikaci, confirmaci a kvantifikaci širokého spektra organických látek. Přístroj musí umožnit dvourozměrnou komprehenzivní separaci umožňující odhalení skrytých sloučenin i ve velmi složité matrici, což je pro nalezení biologicky aktivních látek klíčové. Detekce látek hmotnostní spektrometrií musí umožnit identifikovat jednotlivé látky ve směsi.

Obecné požadavky:

Dodávku musí tvořit kompletní systém pro GCxGC MS:

- s připojením k síti 230 V
- robotický autosampler s jednotkou pro termální desorpci splňující kritéria níže uvedené
- kompletní funkční systém všech komponent včetně ovládacího softwaru, vše musí být navzájem kompatibilní a tvořit funkční celek

Předmět plnění veřejné zakázky musí obsahovat všechny uvedené součásti (a případně další zde neuvedené části tak, aby byl po instalování plně funkční). Za plnou funkčnost se považuje přístroj, který umožňuje pracovat se všemi dále uvedenými technikami a také musí splňovat následující základní technické parametry:

Minimální technické požadavky:

Plynový chromatograf GCxGC MS:

- Plynový chromatograf upravený pro potřeby komprehenzivní GCxGC analýzy
- Dva injektory, jeden split/splitless a druhý typu PTV – programable temperature vaporizer. Oba typy injektorů jsou potřebné z důvodu pokrytí téměř všech používaných analytických přístupů dávkování.

- Plynový chromatograf obsahující primární a sekundární pec. Samostatná pec pro sekundární kolonu s nastavitelným teplotním programem nezávisle na teplotě primární pece minimálně v intervalu 40 až 340°C. Tato teplota může být i nižší než teplota primární pece.
- Kryogenní fokusace při modulaci GCxGC analýzy.
- Funkční modulace minimálně v rozsahu látek C₉-C₃₆.
- Nastavitelná doba modulace GCxGC analýzy s možností (naprogramované) změny její délky a parametrů během analýzy, délka modulace může být zvolena na základě potřeby analýzy minimálně v intervalu 1-50 sekund.
- Chlazení při modulaci musí umožnit měření dlouhých sekvencí bez zásahu uživatele, čemuž vyhovuje např. chlazení ochlazeným vzduchem z kompresoru, který musí být součástí dodávky. Současný stav prostor a využívání budovy zadavatele neumožňuje skladování velkokapacitních kryotanků.
- Požadované vlastnosti kompresoru pro GCxGC modulaci případně pro obsluhu termální desorpce:
 - výstupní kvalita vzduchu: rosny bod min. -20°C, kvalita vzduchu musí být dostatečná pro nepřetržitý provoz pro měření dlouhých sekvencí (tj. minimálně 5 dní) bez zamrznutí termálního modulátoru, min. průtok vzduchu 140 l/min;
 - bezolejový kompresor.

Hmotnostní spektrometr MS:

- Hmotnostní spektrometr s průletovým analyzátozem (MS TOF – Time Of Flight)
- Rozsah hmot: minimální rozsah 5-950 amu (atom mass unit)
- Hmotnostní spektrometr umožňující vysokou frekvenci sběru dat a zápisu na disk: minimálně 250 spekter/sekundu v plném hmotnostním rozsahu. Tato frekvence sběru dat umožňuje softwarové zpracování komprehenzivních GCxGC dat a jejich plnohodnotnou interpretaci.
- Způsob ionizace Elektronovou Ionizací (EI).
- Bezúdržbový iontový zdroj bez ztráty citlivosti přístroje při plném pracovním využití (který není potřeba čistit).
- Vakuový systém schopný pracovat s průtoky nosného plynu minimálně v intervalu od 0 po 6 mL/min.

Autosampler:

- Programovatelný multifunkční, plně SW a HW kompatibilní s GCxGC MS přístrojem
- Umožňující automatické režimy při technikách:
 - nástřik kapalných vzorků – split/splitless, Large Volume Injection (velký objem nástřiku LVI);
 - nástřik plyných vzorků technikou headspace;

- automatizovaný nástřik metodou SPME (Solid Phase MicroExtraction – extrakce na tuhé fázi).
- Headspace ekvilibraci vzorků při teplotách nejméně do 170°C a s vibračním či rotačním pohybem k urychlení dosažení rovnovah.
- Automatickou kondicionaci SPME (Solid Phase MicroExtraction – extrakce na tuhé fázi) vláken mimo injektor plynového chromatografu v samostatném bloku s promýváním inertním plynem.
- Rozsah pro kapalně vzorky minimálně v intervalu od 0,1 µl do 800 µl v závislosti na použité stříkačce.
- Minimální rozsah pro plynné vzorky (techniku headspace) od 0,1 ml do 2 ml v závislosti na použité stříkačce, volitelná teplota stříkačky minimálně v intervalu 50 - 150°C.

Jednotka pro termální desorpci:

- Umožňuje termální desorpci těkavých látek z trubiček se sorbentem či přímo z biologického materiálu.
- Jednotka termální desorpce je přímo spojená s PTV injektorem bez jakéhokoliv dalšího spojovacího mezičlánku z důvodu eliminování netěsností a kontaminací.
- Aktivní chlazení jednotky pro termální desorpci schopné dosáhnout teploty menší než 20°C., čemuž vyhovuje např. chlazení Peltierovým článkem. Současný stav prostor a využívání budovy neumožňuje skladování velkokapacitních kryotanků.
- Peltierův článek musí být kontrolován SW a musí být schopen ochladit jednotku na teplotu menší než 20°C.

Injektory:

- 1 Split/splitless injektor
- 1 PTV injektor (programmable temperature vaporizer)
 - injektor s bezseptovou hlavou
 - Kompatibilní s jednotkou pro termální desorpci.
 - Umožňuje techniky S, SL, LVI, SPME, HS (Split, Splitless, Large Volume Injection, Solid Phase Micro Extraction, HeadSpace)
 - Aktivní chlazení PTV schopné dosáhnout teploty menší než 15°C, čemuž vyhovuje např. chlazení Peltierovým článkem. Současný stav prostor a využívání budovy neumožňuje skladování velkokapacitních kryotanků.
 - Aktivní chlazení musí být řízeno SW a musí být schopno ochladit injektor z teploty 300 °C na 25 °C za méně než 40 sekund.

Ovládací a vyhodnocovací SW:

- Softwarová platforma plně ovládá všechny součásti systému (GCxGC MS, autosampler) včetně diagnostiky přístroje, vyhodnocování a zpracování naměřených dat.
- Práce s 2D daty včetně akvizice, vizualizace, kvantifikace a automatického zpracování v tomto požadovaném softwaru.
- Automatické vyhledávání píků v první a druhé dimenzi, automatické spojování sekundárních píků.
- Dekonvoluce v první a druhé dimenzi.
- Možnost definování oblastí procesování dat v první a druhé dimenzi.
- Rozsáhlá databáze hmotnostních spekter jako knihovna Národního institutu pro standardy Spojených Států Amerických (NIST) verze 2014 a vyšší, možnost použití uživatelských knihoven
- Počet licencí na software: volná licence nebo minimálně 2 kusy.

Data stanice a software:

1 x samostatný počítač (PC – operační systém kompatibilní s požadovaným SW, min. parametry: procesor čtyřjádrový (minimální výkon v PassMark testu 8500 bodů), HDD nejméně 1 TB SATA 3.0 GB/sec, operační paměť nejméně 8 GB DDR 4, síťová karta min. 2GB graphic card dual port 1x DVI, 1x Display port (minimální výkon v PassMark G3D Mark testu 800 bodů), DVD s nainstalovaným požadovaným softwarem, sběr dat z tohoto systému a jejich zpracování včetně kvalitativních a kvantitativních GCxGC MS analýz. Dále instalované knihovny MS spekter ve verzích plně kompatibilních s nabízeným HW a SW. 2x monitor úhlopříčka min. 23 palců 16:9, 1920x1080, konektory monitorů display port a DVI klávesnice s USB konektorem, optická myš s USB konektorem.

1 x Přenosný USB disk s kapacitou minimálně 1TB pro transfer a zálohování naměřených dat z GCxGC MS systému. Minimální požadované parametry USB disku:

- rozhraní: USB 3.0 (zpětně kompatibilní s USB 2.0)
- rychlost čtení: min. 200 MB/s pro USB 3.0 (až 30 MB/s pro USB 2.0)
- rychlost zápisu: min 100 MB/s pro USB 3.0 (až 30 MB/s pro USB 2.0)
- SSD paměť o kapacitě 1TB

Příslušenství:

Součástí dodávky bude „Start kit“ – nutný spotřební materiál a materiál k instalaci předmětu dodávky, odzkoušení/ověření deklarovaných parametrů a zavedení požadovaných metodik, nejméně v níže uvedeném množství:

- 1x kapilární kolona se semi polární fází – délka min. 30 m, vnitřní průměr 0,25 mm, síla fáze 0,25 μ m – (fáze analogická například HP-5ms, SLB-5ms, Rxi-5ms);
- 1x kapilární kolona s polární fází – délka min. 30 m, vnitřní průměr 0,25 mm, síla fáze 0,25 μ m – (fáze analogická například s BPX 50);

- redukční ventil a příslušná kovová kapilára pro přístroje na tlakovou lahev s nosným plynem (He) – pro nejméně 5 metrovou vzdálenost přístroje od tlakových lahví;
- 20 kusů těsnění (ferulek) pro kolony vnitřního průměru 0,25 mm po připojení kolony do injektoru;
- 30 kusů Ferule-těsnění 1/16" 0.4 mm ID 60% vespel / 40% graphite pro připojení kolony do MS detektoru;
- 50 kusů vysokoteplotních sept s nízkým bleedem pro injektor (vhodných nejméně do teploty 350°C);
- 3 kusy vložek (linerů) do injektoru s deaktivací typu „Siltek“ pro techniku split;
- 2 kusy vložek (linerů) do injektoru s deaktivací typu „Siltek“ pro techniku splitless;
- 10 kusy vložek (linerů) do injektoru *Ultra Inert*, 4 mm vnitřní průměr, split/splitless, single taper s vatičkou (nebo ekvivalentní);
- 5 kusy náhradních vláken (filamentů) pro intový zdroj MS detektoru;
- 8 kusů SPME vláken pro nabídnutý autosampler po 2 kusech typů:
 - polydimethylsiloxan
 - divinylbenzen/carboxen/polydimethylsiloxan
 - polydimethylsiloxan/divinylbenzen
 - carboxen/polydimethylsiloxan
- 1x holder pro ruční SPME a minimálně 3 kusy SPME vláken polydimethylsiloxan;
- 20 kusů prázdných termodesorpčních trubiček rozměrově odpovídajících pro nabídnutý autosampler a jednotku termální desorpce;
- 4x spojky pro kolony o rozměrech 0.1- 0.25 mm a 0.1 - 0.25 mm pro GCxGC spojení, typ SilTite™ μ-Union či obdobné;
- 20 kusů ferulek pro spojky kolon o rozměrech 0.1- 0.25 mm a 0.1 - 0.25 mm;
- 15 kusů stříkaček do autosampleru.