**Příloha č. 1— Specifikace předmětu kupní smlouvy**

1) Hmotnostní spektrometr hybridního typu trojitý kvadrupól / lineární iontová past (MS) 2

1. Hmotnostní spektrometr hybridního typu trojitý kvadrupól / lineární iontová past —1 ks 2
2. Řídící jednotka —1 ks 2
3. Další zařízení 3

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| \*\* \*\*\* | \* \*\* | \*\* | EVROPSKA UNIEEvropské strukturální a investiční fondy Operační program Výzkum, vývoj a vzdělávání |



MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ mLADEŽE A Tr,LOVYCHOvv

**1) Hmotnostní spektrometr hybridního typu trojitý kvadrupól / lineární iontová past (MS)**

**2/3**

***Minimální parametry přístroje MS a jeho příslušenství:***

|  |
| --- |
| Odpověď na požadovanýparametr ANO/NEPoložka / minimální požadovaný parametrpříp. dopiněnípožadovaných údajů**a) Hmotnostní spektrometr hybridního typu trojitý kvadrupól / lineární iontová past —1 ks** |
| * Analyzátor hybridního typu trojitý kvadrupól / lineární iontová past
 | ANO |
| * Rozsah m/z alespoň 5-2000 amu
 | ANO |
| * Iontový zdroj pro ionizaci elektrosprayem vhodný pro průtoky minimálně v rozsahu 5-200 µl/min
 | ANO |
| * Kolizní cela a detektor v nelineární konfiguraci pro minimalizaci šumu neutrálními látkami
 | ANO |
| * Minimální dwell time 1 ms
 | ANO |
| * Stabilita MS kalibrace: odchylka <0,1 amu/24hod
 | ANO |
| * Maximální doba přepínání polarity během měření 20 ms
 | ANO |
| * Lineární dynamický rozsah detektoru alespoň 5 řádů
 | ANO |
| * Skenovací rychlost alespoň 12000 u/s
 | ANO |
| * Skenovací režimy (systém musí umožňovat následující typy měření):
* Sken MS
* SIM
* MRM
* Měření neutrální ztráty
* Sken produktových spekter
* Sken prekurzorových iontů
* Sken produktů MS/MS po izolaci prekurzoru kvadrupólem 1, fragmentaci v kolizní cele a akumulaci iontů v lineární iontové pasti
* MS/MS/MS s izolací prekurzoru pro každý stupeň MS
 | ANO |
| **Cena v Kč bez DPH** za **1 kus hmotnostního spektrometru dle výše uvedených specifikací:** | **4.347.500,00 Kč bez DPH** |
| **b) Řídící jednotka —1 ks** |
| * Řídící PC pro ovládání celé sestavy, operační systém Windows 7 64-bit či vyšší, anglická verze
 | ANO |
| * Minimálně 22" LCD monitor
 | ANO |
| * Odpovídající software pro řízení celé sestavy pro provádění měření a vyhodnocování analýz
 | ANO |
| **Cena v Kč bez DPH za 1 kus řídící jednotky dle výše uvedených specifikací:** | **414.600,00 Kč bez DPH** |

3 / 3

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | EVROPSKÁ UNIEEvropské strukturální a investiční fondy Operační program Výzkum, vývoj a vzdělávání |  |
| MINISTERSTVO ŠKOLSTViMLADEŽE A TĚLOVÝCHOVY |

|  |
| --- |
| **c) Další zařízení** |
| * Lineární čerpadlo pro přímý nástřik vzorků (nastavitelný průtok 0,1-500 µl/min)
 | ANO |
| * 6-cestný 2-polohový přepínací ventil (alternativně 10-cestný 2-polohový)
 | ANO |
| * Zdroj vakua s dostatečnou kapacitou pro nabízený MS
 | ANO |
| * Zdroj dusíku s dostatečnou kapacitou pro nabízený MS
 | ANO |
| * Záložní zdroj elektrické energie UPS pro zálohování celé sestavy
 | ANO |
| **Cena v Kč bez DPH za 1 sadu zařízení dle výše uvedeného složení a parametrů (vč. uvedených záručních podmínek):** | **699.400,00 Kč bez DPH** |

Poznámka pro účastníka: Nespinění minimálních zadavatelem požadovaných parametrů (byť jen jednoho parametru) znamená nespinění zadávacích podmínek. Naopak dopiněné konkrétní hodnoty požadovaných parametrů či požadovaného popisu nejsou předmětem hodnocení nabídky.

|  |  |
| --- | --- |
| **Nabídková cena celkem v Kč bez DPH dle výše uvedených parametrů, včetně souvisejícího pinění dle čl. II odst. 2 kupní smlouvy** | **5.461.500,00 Kč bez DPH** |
| **Hodnota DPH** | **1.146.915,00****Kč hodnotu DPH** |
| **Nabídková cena celkem v Kč včetně DPH dle výše uvedených parametrů, včetně souvisejícího pinění dle čl. II odst. 2 kupní smlouvy** | **6.608.415,00 Kč včetně DPH** |

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| \*\*\*\* | \*\* | \*\* | EVROPSKÁ UNIEEvropské strukturální a investiční fondy Operační program Výzkum, vývoj a vzdělávání |



MiNIS1ERSTVO ŠKOLSTV! ADEŽE A Ťel..0%.,'CliOVY

**Příloha č. 2 — Specifikace nabízeného pinění**

**1/6**

**SCIEX**

**Hmotnostní spektrometr SCIEX QTRAP 6500+**

**LC/MS/MS spektrometr s analyzátorem trojitý kvadrupol / lineární iontová past (tj. trojitý kvadrupol, kde 3. kvadrupol může pracovat jako lineární iontová past).**



2 / 6

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
|  |  | **EVROPSKÁ UNIE** |  |
| \*\* | \*\* |
| \* | \* | Evropské strukturální a investiční fondy |  |
| \*\* \* |  | Operační program Výzkum, vývoj a vzdělávání | MINiS f ERSTVO ŠKOL S'f VI |
|  |  |  | MLADEŽE A TCLOVYCHOVY |

**Zdroj OptiFlow Turbo V**

Iontový zdroj pro atmosferickou ionizaci technikou elektrospray.

Zdroj je vybaven vysokoteplotními keramickými topnými tělesy pro spolehlivou práci za vysokých průtoků a orthogonálním zmlžováním pro zdokonalenou robustnost.

Zmlžování: orthogonální

Topná tělesa: 2 vysokoteplotní samočisticí keramická tělesa s teplotním čidlem

Změna zdroje: Interface typu plug-in. Zdroj lze z přístroje sejmout bez použití nářadí a nahradit ho

jiným zdrojem do 5 minut.

Rozsah průtoků: od 51.11/min. do 200 podle použité próby

Zmlžovací plyn (GS1): od O do 90 psi (0 — 0,62 MPa), uživatelsky nastavitelný, vzduch Zero Grade nebo

dusík

Turbo plyn (GS2): od okolní teploty do 750°C a od O do 90 psi, uživatelsky nastavitelný, vzduch Zero

Grade nebo dusík

**Hmotnostní spektrometr** Interface

Přístroj má přímé krátké rozhraní (0,8 mm) bez kapiláry mezi atmosferickou a vakuovanou částí s barierou clonícího plynu pro udržení čistoty analyzátoru a optimální deklusteraci iontů. Rozhraní umožňuje analýzu velkých dávek složitých matric jako je moč, plasma, a extrakty rostlin po dlouhou dobu bez nutnosti údržby nebo zhoršení výkonnosti.

Přechod do dalšího stupně vakua je zajištěn vodičem iontů lonDrive QJet® 2. Jedná se o kvadrupol pracující za tlaku jednotek Torr, který fokusuje maximální množství iontů do dalšího stupně. Výsledkem je maximální výtěžnost přechodu iontů ze zdroje do analyzátoru.

Za další štěrbinou je umístěn patentovaný kvadrupol Q0 s tlakem 8 mTorr a radiofrekvenčním polem pro další fokusaci iontů.

Analyzátor

Separační kvadrupol Q1 je vyrobený z keramické tyče s pozlaceným povrchem. Předfiltr je umístěn mezi kvadrupolem s radiofrekvenčním polem a prvním separačním kvadrupolem pro další fokusaci iontů.

Pro vysoce účinnou MS/MS fragmentaci se používá patentovaná vysokotlaká kvadrupolární kolizní cela
Qurved LINAC (Q2). Kolizní cela je konstruována do oblouku 180'pro minimalizaci šumu způsobeného

neutrálními molekulami.

Kolizní cela Qurved LINAC je vybavena podélnou akcelerací iontů. Nedochází v ní ke zpomalení letu iontů, a tím ke křížovému signálu (cross talk) mezi analyty s produktovými ionty o stejném m/z.

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| \*\*\*\*\* | \* \*\* | \*\*\* | EVROPSKÁ UNIEEvropské strukturální a investiční fondy Operační program Výzkum, vývoj a vzdělávání |



MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ

MLADCŽE A Tt:LOVYCIIOVY

Kolizní cela umožňuje multikomponentní kolizí indukovanou disociaci (CID) minimálně 500 analytů (1 SRM přechod pro 1 a nalyt) v jednom časovém segmentu během eluce chromatografického píku bez ztráty odezvy.

**3 / 6**

Zkrácení pozorovacího času (dwell time) MRM přechodu ze 100 ms na 5 ms nezpůsobí zhoršení odezvy o více než 1%.

Druhý analyzátor iontů je kvadrupol 03 (keramická tyč s pozlaceným povrchem). Vakuový systém

Přístroj je vybaven diferenčně čerpaným vakuovým systémem se vzduchem chlazenou turbomolekulární pumpou a dvěma olejovými vývěvami pro první stupeň vakua.

Detekce

Přístroj má detektor s elektronovým násobičem lonDrive s kontinuální dynodou pracující v módu počítání pulzů. Je schopen rychlé změny mezi detekcí pozitivních a negativních iontů. Polarita detektoru se může měnit mezi jednotlivými skeny.

**Software a operační systém** Datastanice

Datastanice pracuje na bázi operačního systému Windows 7 / 10, 64 bit a je pině multi-tasking (např. je možné zpracovávat data v průběhu jejich měření).

Konfigurace je minimálně: Dell Optiplex XE2, Core i5-45705 procesor, 8 GB RAM, 2x 2TB HDD (RAID 1), DVD RW (CD RW capable), 3 ethernet porty, myš, klávesnice, monitor Dell 22" LCD.

Ovládání systému a sběr dat

Systém obsahuje software **Analyst** verze **1.7** pracující pod Windows 10 (64 bit) nebo Windows 7 (64 bit nebo 32 bit) pro ovládání systému a sběr dat.

Rychlé snímání spekter až 20000 u/s (LIT) a 12000 u/s (TO).

Pozorovací čas (dwell time) od 1 ms výše, prodleva mezi MRM přechody nebo skeny od 1 ms. Snímání spekter MS a monitoring vybraných iontů (SIM).

Střídání MS a CID/MS skenů pro získání informace o molekulové hmotnosti a struktuře v rámci jednoho nástřiku, přepínání mezi MS a MS/MS během 1 ms.

Snímání spekter produktů MS/MS pro získání strukturních informací Snímání spekter prekurzorů a přímé měření neutrální ztráty

Možnost pojmenování MRM přechodů v okamžiku tvorby akviziční metody

Ve skenovém režimu Enhanced Product Ion sken (EPI) je prekurzor izolován na prvním kvadrupólu (01) a discociován v kolizní cele (Q2) stejným způsobem jako na trojitém kvadrupólu. V kolizní cele vznikne široké

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| \*\*\*\* | \*\* | \* \* | EVROPSKÁ UNIEEvropské strukturální a investiční fondy Operační program Výzkum, vývoj a vzdělávání |



**MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ MLADEŽE A TCLOVYCHDV,**

spektrum produktových iontů v celém rozsahu m/z bez jakékoli diskriminace. Produktové ionty přecházejí z kolizní cely do třetího kvadrupólu, který se chová jako LIT a všechny produktové ionty akumuluje. Po optimálním napinění pasti jsou všechny zachycené ionty skenovány na detektor.

**4/6**

V režimu MS/MS/MS je prekurzor izolován na prvním kvadrupólu (Q1) a discociován v kolizní cele (Q2). Vznikle produktové ionty jsou zachyceny lineární iontovou pastí, v ní je izolován ion o zvoleném m/z a znovu fragmentová n.

Kombinace skenových módů (sken MS, SIM, MRM, sken prekurzorů, sken neutrální ztráty, MS/MS) pomocí rozhodovacího algoritmu Information Dependent Acquisition (IDA), který definuje následující typ snímání dat podle výsledků měření v předchozím skenu.

Automatické zobrazení každého experimentu z analýzy obsahující více experimentů (např. MS a CID/MS)

**Instrument Optimization Wizard** slouží k nastavení automatických testů přístroje, kontrole hmotové kalibrace a v případě potřeby k automatickému přeladění přístroje. Uživatel se může v rámci nastavení rozhodnout, zda automatické přeladění akceptuje. Vždy je možné se vrátit k předchozí kalibraci. Procedura vydává zprávu o stavu přístroje.

**Automatická optimalizace podmínek** měření pro jednotlivé analyty včetně směsi analytů s nepřekrývajícími se molekulovými hmotnostmi. Jsou optimalizovány parametry analytu (deklusterační potenciál, volba produktových iontů, kolizní energie apod.) a parametry zdroje (teplota turbo plynu, průtoky plynů, apod.). Výsledkem je hotová akviziční metoda, do které se pouze přidají parametry pro chromatografii (možnost automatického sloučení metod).

**Scheduled MRM** optimalizuje využití času, který je k dispozici pro měřicí cyklus. K MRM přechodům je zadán očekávaný čas eluce píku a časové okno, které bere v úvahu šířku píků a stabilitu retenčních časů. Software automaticky vypočte časový úsek, ve kterém jsou jednotlivé MRM přechody měřeny. Výsledkem je více datových bodů pro pokrytí chromatografického píku, čímž se zlepší reprodukovatelnost stanovení a meze detekce. Dalším důsledkem je možnost multikomponentních měření teoreticky bez omezení počtu MRM přechodů.

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| **MS Ady4nced MS I****E effen1** | **Schod/Ad MRM** | **Ifft43d 1d** |
|  |  |  |
| **Scanlype I MRM [4R141****PeklitY****4.;** porLw*'* ***Nefli\*Ve*** |  |  |  |  |
|  | **01 klas\* 103 Mata CE *DAL* A.** |
|  | **5180 5760 5180 5180 520 6** | **414 2 445 3 6131 527 3 418 2** | **SVS/PSLOPASAN 303101 439****21 5 APOD 5V9-PSLOPASAH 3y3/9+4 439****215 *APCe* SVSLPSLDPASAH 3ySigli 439****21 5 .0013 5v5LPSLOPASAX 364 Vl 43 9****215 A9013 SVSLPSLDPASAK 363 hrav 44 0** |
| **2** |
| **3** |
|  |
|  |  | s |
| **14R14 delecbon witclow** | **Dbc1** | **6** | **520 6** | **1193** | **21 5 AP0f3 SVSLPSLDPASAN 3y3 *?vrby* 410** |
|  |  |  | **520 6** | **6171** | **21 S APOB SVS1,51.1)PASAX 3y5 hey. 410** |
|  |  | 8 | **520 6** | **631 3** | **21 5 APOD SVSLPSLOPASAIL304 heav *11*0** |
|  |  | **9** | **666 8** | **589 3** | **15 9 AP.X1 EFONTLSOK 204 bil 51 3** |
|  |  | **10** | **666 8** | **531 3** | **759 APOC1 EFONTLEDN 2y3 S13** |
|  |  |  | **666 8** | **1712** | **1513 APOC1 EFONT1.5011 2b3 hsit SI 3** |
| **41** | **005 O** | ***CAA A*** | **.14 O 00,,, cenu. crd, *',A L,. el*****Period S(4nmary** |
| **i Age1 Sun hne** | **Dec]** |
| **Edoi PDandeis** | **DumbonOCP3 Dm) Delay Trne** I**Vis,c1****Cycits 31:01.... Cyck03Č113 IsecI** |
|  |

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | EVROPSKÁ UNIEEvropské strukturální a investiční fondy Operační program Výzkum, vývoj a vzdělávání |  |
| MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍML ADE2C A TÉLOVVCII0 Vy |

Jednoduché nastavení parametrů pro Scheduled MRM včetně pojmenování MRM přechodů

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  |  |
|  |  |  |
| **111** |  |

~MOR 611•61.3••••

-91IN~

**1=!=**

**5 / 6**

**lower number of MRM monitored**

**higher number of MRM monitored**

Proměnlivý počet MRM přechodů, které jsou snímány

Algoritmus **Dynamic Background Subtraction** (DBS) zajišťuje dynamické odečítání pozadí v reálném čase v průběhu probíhající analýzy pro optimální volbu prekurzorových iontů.

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **.10 /.3•11.3/10/0 110.41\* 1 .••••••10** | **M00047/ -.'414.......4704-001.0,** |  | **00./...178 *eir•*** |
| **./21•4** |  |  |  |  |  |  |
| .0.11 |  |  |  |  |  |  |
| **.1094** |  |  |  |  |  |  |
| ***90.4*** |  |  |  |  |  |  |
| ••••11 |  |  |  |  |  |  |
| **10•4** |  |  |  |  |  |  |
| **«M 0** |  |  |  |  |  |  |
|  |  | 411. |  |  |  |
|  | **10** | **11 12 10** 111 | 10 |  |

Díky DBS je zachycen světle modrý, zelený i šedý pík (9,96 min.) a automaticky
změřeno jeho produktové spektrum.

Záznam podmínek měření v datovém souboru.

Kompatibilita se škálou komerčně dostupných HPLC čerpadel, autosamplerů, manuálních injektorů a detektorů

Zpracováni dat

Výkonná tvorba knihoven jejich prohledávání (vyhledávání spekter podle m/z a UV při různých energiích fragmentace a polaritách ionizace)

Trojrozměrné zobrazení MS a UV dat

6 / 6

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | EVROPSKÁ UNIEEvropské strukturální a investiční fondy Operační program Výzkum, vývoj a vzdělávání |  |
| MINISTERSTVO ŠKOLSTviMIADE2E A TtLOVYCHOVY |

Plně automatické kvantitativní zpracování dat a tvorba výstupních sestav (Analyst Reporter). Přímý a snadný přenos dat do dalších programů jako MS Word, Excel, PowerPoint, atd., jak technikou Copy/Paste, tak exportem výstupních sestav.

Plně automatické a přizpůsobitelné zpracování dat pomocí maker. Software SCIEX OS - MQ pro kvantifikaci malých a velkých molekul.

**Výkonnost systému**

**Rozsah** m/z

Přístroj má rozsah m/z 5 — 2000 u. Rychlost snímání spekter

Rychlost snímání spekter je až 20000 u/s (režimy lineární iontové pasti) a až 12000 u/s (režimy trojitého kvadrupólu).

Změna polarity

Přístroj je schopen přepínat z pozitivního módu do negativního za 5 ms a zpět z negativního do pozitivního za dalších 5 ms. Přístroj je schopen takto pracovat kontinuálně a ukládat data z pozitivního a negativního módu na disk.

**Dynamický** rozsah

Přístroj má dynamický rozsah až 5,5 řádů (počítání pulzů).

**Stabilita** m/z

Stabilita m/z je do 0,1 u po dobu 24 hodin za normální teploty a po ustálení vakua a teploty. Křížový signál

Cross talk v pozitivním módu při monitorování přechodů 609/195 s pozorovacím časem (dwell time) 2 ms a prodlevou mezi přechody 3 ms není detekovatelný.

**Příslušenství**

Přístroj má vestavěné lineární čerpadlo pro přímé nasávání vzorků, které je schopné dodávat průtok od 10 nl/min. do více než 10 ml/min. Přístroj má vestavěný 6cestný dvoupolohový přepínací kohout, který lze využít pro dávkování, odklonění balastu, nebo přepínání kolon. Obě zařízení jsou **pině** softwarově ovládána.

**Záložní zdroj elektrické energie**

Zálohování sestavy je zajištěno dvěma dvojkonverzními UPS Eaton PowerWare, 3000 VA. **Generátor plynů**

Zdrojem dusíku je membránový generátor PEAK Scientific s kapacitou 18 l/min. dusíku pro clonící plyn (Curtain Gas) a kolizní plyn. Generátor vyžaduje přívod vzduchu 1151/min. o tlaku 7 bar.