

Příloha 3 – minimální technické požadavky

Část A: Plynový chromatograf s tandemovým ultra-vysokorozlišovacím hmotnostním spektrometrem a multifunkčním samplerem

	Parametr	
1. Systém pro přípravu vzorků a automatické dávkování do plynového chromatografu	1a. Robotické rameno	Délka ramene minimálně 160 cm
		Možnost automatické výměny modulů se stříkačkami a sorpčními vlákny/materiály
		Statický držák pro min. 3 nástřikové moduly
	1b. Modul pro termální desorpci	Nástřikový modul pro umístění sorpčních trubiček umožňujících <i>in-tube extraction</i>
		Modul pro termální desorpci s kapacitou alespoň 50 sorpčních trubiček
	1c. Modul pro mikroextrakci tuhou fází (SPME)	Zásobník vzorků pro min. 45 vialek objemu 20 ml
		Nástřikový modul pro umístění standardních SPME vláken
		Nástřikový modul pro umístění velkokapacitních SPME Arrow
		Agitátor pro termostatování vzorků k headspace nástřiku s kapacitou alespoň 6 x 20 ml vialek
		Modul pro intenzivní termostatování a třepání vzorků s velkokapacitním SPME vláknem
	1d. Modul pro nástřik kapalého extraktu a 'head space' nástřiku	Kondicionační stanice pro SPME vlákna a velkokapacitní SPME Arrow
		Zásobník vzorků pro min. 150 vialek objemu 2 ml
		Nástřikový modul pro umístění stříkaček pro dávkování kapalin alespoň v rozsahu do 100 µl
		Nástřikový modul pro umístění stříkačky pro dávkování headspace alespoň v rozsahu do 5 ml
2. Plynový chromatograf (GC)	2a. Nástřikový prostor	Nástřik v režimech split/splitless s operační teplotou min. do 400 °C
		Nástřik v režimu PTV se zpětných proplachem, s operační teplotou min. do 450 °C, s možností tvorby min. 3 teplotních ramp a s rychlostí ohřevu až 700 °C/min a chlazením pomocí CO ₂
		Nastavitelný tlak v rozmezí min. 0-500 kPa s přesností alespoň 0,05 kPa
		Nastavitelný splitovací poměr v rozmezí min. 1 – 12 500 :1
	2b. Pec	Plně digitální regulace tlaků, průtoků a teplot
		Teplotní rozmezí pece minimálně 5 °C nad teplotu laboratoře až 450 °C
		Přesnost nastavení teploty pece alespoň 0,1 °C
		Maximální rychlost ohřevu termostatu 50 °C/min v rozsahu min. 50-300 °C
3. Vysokorozlišovací tandemový hmotnostní spektrometr (HRMS/MS)	3a. Iontový zdroj	Rychlost chlazení ze 350 na 50 °C za maximálně 5 min
		Softwarově ovládaný modul pro šetření helia jako mobilní fáze (změna helia za levnější plyn)
		Iontový zdroj typu EI s nastavitelnou teplotou alespoň do 350 °C
	3b. Hmotnostní analyzátor	Iontový zdroj typu CI s nastavitelnou teplotou alespoň do 350 °C
		Přímý vstup do hmotnostního spektrometru umožňující výměnu a čištění iontového zdroje bez porušení vakua
		Možnost akvizice iontů s přesnou hmotou v režimu MS, MS/MS po i bez selekce prekurzorového iontu
		Rozlišení minimálně 60 000 FWHM na m/z 200
		Hmotnostní rozsah min. 50-3000 m/z pro vysokorozlišovací analyzátor

Parametr		
4. Další položky		Lineární rozsah analyzátoru $>10^5$
		Měření m/z s přesností < 1 ppm s interní kalibrací
		Citlivost přístroje při použití EI - poměr S/N $> 10\,000:1$ při analýze 100 fg oktafluoronaftalenu
	4a. Pracovní stanice pro kontrolu GC-MS	Pracovní stanice (počítač) pro kontrolu GC-MS výkonnostně a kapacitně nakonfigurovaná pro nabízenou sestavu, min. požadavky: datové úložiště min 2 TB, operační paměť minimálně 16 GB RAM, 2 barevné monitory, operační systém Windows 10.
	4b. Software	Řídící a vyhodnocovací software umožňující řízení přístroje, sběr a zpracování dat; dále vývoj instrumentálních metod; export dat do MS Excel.
	4c. Vyhodnocovací pracovní stanice + software	Vyhodnocovací pracovní stanice (počítač) výkonnostně a kapacitně nakonfigurovaná pro nabízenou sestavu – min. požadavky: pevný disk min. 2 TB (SSD), operační paměť min. 128 GB RAM, procesor min. s 16 fyzickými jádry, grafická karta (min. 4 GB, pro zpracování grafických dat), dva monitory s úhlopříčkou min. 27".
		Software: umožňující cílený screening a kvantifikaci (min. 5 licencí) s aktualizací během doby záruky, knihovna hmotnostních GC-MS spekter NIST
		Software: vyhodnocovací pracovní stanice disponující specializovaným softwarem umožňujícím zpracování objemných celospektrálních dat pro účely necílené analýzy včetně identifikace metabolitů, dále vybavená statistickými nástroji.
	4d. Záložní zdroj	Záložní zdroj typu online s dvojitou konverzí, min. 8 kVA a s kapacitou baterií pro minimálně 30 minut provozu celého systému
	4e. Zaškolení	Délka trvání min. 2 dny
	4f. Záruka	Záruka na celý systém min. 3 roky

Část B: Plynový chromatograf s tandemovým hmotnostním spektrometrem a autosamplerem

	Parametr	
1. Systém pro přípravu vzorků a automatické dávkování do plynového chromatografu	1a. Robotické rameno	Délka ramene minimálně 160 cm
		Možnost automatické výměny modulů se stříkačkami a sorpčními vlákny/materiály
	1b. Modul pro mikroextrakci tuhou fází (SPME)	Zásobník vzorků pro min. 45 vialek objemu 20 ml
		Nástříkový modul pro umístění standardních SPME vláken
		Nástříkový modul pro umístění velkokapacitních SPME Arrow
		Agitátor pro termostatování vzorků k headspace nástříku s kapacitou alespoň 6 x 20 ml vialek
		Modul pro intenzivní termostatování a třepání vzorků s velkokapacitním SPME vláknem
		Kondicionální stanice pro SPME vlákna a velkokapacitní SPME Arrow
	1c. Modul pro nástřík kapalného extraktu a 'head space' nástříku	Zásobník vzorků pro min. 150 vialek objemu 2 ml
		Nástříkový modul pro umístění stříkaček pro dávkování kapalin alespoň v rozsahu do 100 µl
		Nástříkový modul pro umístění stříkačky pro dávkování headspace alespoň v rozsahu do 5 ml
2. Plynový chromatograf (GC)	2a. Nástříkový prostor	Nástřík v režimech split/splitless s operační teplotou min. do 400 °C
		Nástřík v režimu PTV se zpětných proplachem, s operační teplotou min. do 450 °C, s možností tvorby min. 3 teplotních ramp a s rychlostí ohřevu až 700 °C/min a chlazením pomocí CO ₂
		Nastavitelný tlak v rozmezí min. 0-500 kPa s přesností alespoň 0,05 kPa
		Nastavitelný splitovací poměr v rozmezí min. 1 – 12 500 :1
	2b. Pec	Plně digitální regulace tlaků, průtoků a teplot
		Teplotní rozmezí pece minimálně 5 °C nad teplotu laboratoře až 450 °C
		Přesnost nastavení teploty pece alespoň 0,1 °C
		Maximální rychlost ohřevu termostatu 50 °C/min v rozsahu min. 50-300 °C
		Rychlost chlazení ze 350 na 50 °C za maximálně 5 min
	2c. Další položky	Softwarově ovládaný modul pro šetření helia jako mobilní fáze (změna helia za levnější plyn)
3. Tandemový hmotnostní spektrometr (MS/MS)	3a. Iontový zdroj	Iontový zdroj typu EI s nastavitelnou teplotou alespoň do 350 °C
		Iontový zdroj typu CI s nastavitelnou teplotou alespoň do 350 °C
	3b. Hmotnostní analyzátor	Hmotnostní spektrometr typu trojitý kvadrupól
		Skenovací rychlost alespoň 20 000 amu/s, až 600 SRM přechodů/s
		Hmotnostní rozsah min. 20-1100 m/z
		Při nástříku 1 µl standardu oktafluornaftalenu o koncentraci 100 fg/µl poskytuje poměr S/N alespoň 20 000:1 pro přechod z m/z 272 na 222 při použití He jako nosného plynu
		Přímý vstup do hmotnostního spektrometru umožňující výměnu a čištění iontového zdroje bez porušení vakua
4. Další položky	4a. Pracovní stanice pro kontrolu GC-MS a vyhodnocování dat	Pracovní stanice (počítač) pro kontrolu GC-MS výkonnostně a kapacitně nakonfigurovaná pro nabízenou sestavu, min. požadavky: datové úložiště min 2 TB, operační paměť minimálně 16 GB RAM, 2 barevné monitory, operační systém Windows 10.

	Parametr	
	4b. Software	Řídící a vyhodnocovací software umožňující řízení přístroje, sběr a zpracování dat; dále vývoj instrumentálních metod; export dat do MS Excel.
		Software: umožňující cílený screening a kvantifikaci (min. 3 licencí) s aktualizací během doby záruky, knihovna hmotnostních GC-MS spekter NIST
	4d. Záložní zdroj	Záložní zdroj typu online s dvojitou konverzí, min. 8 kVA a s kapacitou baterií pro minimálně 30 minut provozu celého systému
	4e. Zaškolení	Délka trvání min. 2 dny
	4F. Záruka	Záruka na celý systém min. 3 roky