

Příloha č. 1 - specifikace předmětu plnění

Název veřejné zakázky:	LFP - Rozšíření hmotnostního spektrometru Bruker timsTOF Pro 2 pro metabolomické aplikace
Zadavatel:	Univerzita Karlova, Lékařská fakulta v Plzni

(dále jen „veřejná zakázka“)

Dodavatel, včetně uvedení své právní formy:	Bruker s.r.o.
Sídlo:	Pražákova 1000/60, 619 00 Brno, Česká republika
IČO:	28297211
Osoba oprávněná jednat jménem účastníka:	Gary Hermann Kruppa, jednatel společnosti Marie Chmelíková, jednatel společnosti

Nabízený systém ve veřejné zakázce je určen jen pro výzkumné účely (RUO, Research Use Only). Nejedná se tedy o přístroj pro medicínské účely s certifikací IVD (In Vitro Diagnostics).

Dodávka a instalace kapalinového chromatografu Bruker Elute PLUS, metabolomického software s příslušenstvím

Příslušenství pro hmotnostní spektrometr

Pol. Popis

1. #8256678 Aktuátor pro přepínací ventil
2. #8263424 Ventil 6port
3. #8209919 Dávkovací smyčka, 20 uL
4. #8264785 Kalibrační kit

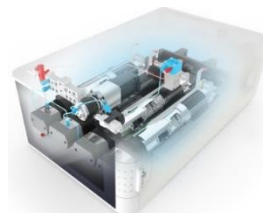
Systém vysokotlaké chromatografie

5. #1845343 Elute PLUS UHPLC system, cool/heat

Celkové rozměry: 69,5 cm (výška) x 52 cm (šířka), 57,5 cm (hloubka), váha 68 kg

Elute UHPLC pumpa

- UHPLC Binární pumpa s vysokotlakým mícháním mobilní fáze (HPG)
- Průtok mobilní fáze:
 - 0,001 až 2,000 mL/min: 1300 bar
 - 2,001 to 5,000 mL/min: 800 bar
 - Krok 1 µL/min
- Tlakový rozsah:
 - 0 - 1300 Bar (0 – 18 855 psi) v rozsahu 0-2,000 µl
 - 0 - 800 Bar (0 – 11 603 psi) v rozsahu 2,001 – 5,000 µl
- Gradientové profily: Lineární, kroky, konkávní (4), konvexní (4)
- Správnost míchání gradientu mobilní fáze: $\pm 0.5\%$ v rozsahu 5-95% (200 - 2000 µl/min)
- Přesnost míchání gradientu mobilní fáze: $\leq 0,15\%$ nebo 0,01 min SD, co je větší
- Rozsah míchání: 0-100%, krok 0,1%
- Kompresibilitní kompenzace: Kontinuální a plně automatická
- Doba cyklu: < 20 s
- Objem zpoždění: 45,6 µL při použití standardního mixéru o objemu 35 µL
- Celkový objem zpoždění: 161 µL (včetně mixéru a smyčky) při použití standardní smyčky o objemu 100 µL sample
- Správnost průtoku mobilní fáze: $\pm 1\%$ nebo ± 10 µl/min, co je větší
- Přesnost průtoku mobilní fáze: $\leq 0,075\%$ RSD nebo min SD < 0,005 min, co je větší
- Rampování průtoku: Automatické měkké rampování
- pH rozsah: 1.0-12.5 (1-10 pro purge valve)
- Pulsace tlaku: $\leq 1\%$ systémového tlaku nebo < 5 Bar, co je větší
- Tlakové limity: Hodnoty nízkého a vysokého tlaku jsou nastavitelné
- Mrtvý objem mixéru: 35 µL
- Rozpouštědla: výběr ze dvou mobilních fází pro každý modul (A1 nebo A2 a B1 nebo B2)
- Integrovaný degaser, 2 kanály
- Proplachování (Priming): Skutečný automatický proplachovací (priming) proces
- Čištění (Purging): Automatický purge ventil, 3 ml/min na kanál
- Aktivní oplach pístů
- Selekční ventil pro výběr rozpouštědel
- Rozsah gradientu: 0-100%
- Rozměry: 19 cm (výška) x 33 cm (šířka), 54 cm (hloubka)
- Senzor úniku mobilní fáze



Autosampler

- UHPLC autosampler s variabilním objemem nástřiku, nástřikovou smyčkou a termostatem vzorků
- Tlakový rozsah: 0 - 1300 Bar (0 – 18 855 psi)
- Nástřiková smyčka: 100 µL standard (lze použít smyčky s následujícími objemy: 2, 5, 10, 50 µL)
- Rozsah nástřikovaných objemů: 1–100 µL s krokem 1 µL (s nainstalovanou smyčkou 100 µL)
- Rozšiřitelný objem nástřiku: až 9999 µL (v závislosti na použité smyčce a stříkačce)
- Režim nástřiku: Full loop, partial loop fill a µL-Pick-up Mode
- Správnost nástřiku: závisí na použitém módu
- Linearita nástřiku: $\geq 0,999$
- Přesnost nástřiku: <0,3% pro full loop, <0,5% pro partial loop, <1% pro µL-Pick-up mód (pro nástřikové objemy ≥ 5 µL)
- Přenos vzorku (Carryover): <0,001%
- Oplach injekční jehly:
 - K dispozici 2 rozpouštědla, volitelné mytí statoru, vnitřní a vnější mytí jehlou se sušením
 - Mytí lze naprogramovat mezi injekcemi a mezi lahvičkami/jamkami
- Přepínání ventilů: Technologie ILD™ pro přesné vstřikování UHPLC
- Doba cyklu (mezi nástřiky):
 - < 60 sekund ve všech režimech nástřiku
 - < 20 sekund pro typickou injekci 10 µL (smyčka plněna proplachovacím pufrem)
- Chlazení: Ano
- Přesnost nastavení teploty: ± 2 °C při 4 °C

- Termostatování vzorků: 4 °C - 40 °C (při teplotě laboratoře do 25°C)
- Tlakově asistovaný nástřik: Koncepte vstřikování PASA™, parametr metody
- Kapacita autosampleru:
 - 2x 96 nebo 2x 384 mikrotitrační destičky
 - 2x tray pro 54 vialek o objemu 2 ml (celkem 108 vialek)
 - 1x tray pro 30 vialek o objemu 10 ml (optional)
 - Mikrotitrační destičky a vialky nelze používat v kombinaci
- pH rozsah: 1-12
- Rozsah viskozity: 0.1 až 5 cP
- Minimální množství vzorku: 3 µL zbytek, s použitím Waters Total Recovery 2ml vialek (s jehlou o výšce 2 mm)
- Ztráty vzorku: žádná ztráta vzorku v režimu µL-Pick-up
- Rozměry: 36 cm (výška) x 33 cm (šířka), 57,5 cm (hloubka)
- Senzor úniku mobilní fáze

6. #1854521 Elute termostat kolon se selekčním ventilem

- Externí modul
- Rozsah vyhřívání:
 - -15° pod okolní teplotu až 75 °C (se selekčním ventilem), při teplotě laboratoře 20°C je rozsah 5 – 75 °C
 - -15° pod okolní teplotu až 90 °C (bez selekčního ventilu), při teplotě laboratoře 20 °C je rozsah 5 – 90 °C
 - krok 1 °C
- Počet teplotních zón: 1
- Možnost instalace až 6 kolon o délce 30 cm
- Selekční ventil pro výběr z až 6 kolon, ovládání přímo ze SW
- Přesnost teploty: lepší než 0,1 °C
- Stabilita teploty: lepší než 0,1 °C
- Vyhřívání: 10 °C/min z 40 °C na 60 °C
- Chlazení: 2 °C/min ze 60 na 40 °C
- Spojky: MarvelXACT™
- Způsob chlazení: nucené chlazení vzduchem
- Tlakový rozsah: 0 - 1300 Bar (0 – 18 855 psi), s ventilem pro výběr kolony: 1034 Bar
- Senzor úniku mobilní fáze

7. #DAL07056 Elute - Rozšíření záruky o 1 rok

Elute - Rozšíření záruky o 1 rok je servisní kontrakt (Bruker Warranty Extens Elute PLUS), který zahrnuje náklady na druhý roky záruk (celková doba záruky 2 roky)

- veškerou práci, cesty a ubytování servisního technika
- veškeré potřebné náhradní díly
- neomezenou, bezplatnou a rychlou vzdálenou diagnostiku a servis pomocí WebEx připojení k přístroji
- reakci servisu max. do 48 hodin od nahlášení závady
- bezplatný update zakoupeného ovládacího a vyhodnocovacího SW společnosti Bruker na nejnovější verzi, včetně školení v rámci preventivní návštěvy

8. #DAL00377 Esenciální servisní kontrakt – 1 rok

Esenciální servisní kontrakt (Bruker LabScape Essential) je smlouva o údržbě, která zahrnuje jednu roční plánovanou údržbu a základní služby dostupné na dálku během druhého roku záruky.

Servisní kontrakt Bruker LabScape Essential Elute zahrnuje náklady na:

- jednu roční preventivní údržbu LC přístroje a PM kit se spotřebním materiálem k LC

9. #3-PA Instalace a integrace s MS, včetně školení onsite (16 hodin)

Instalace Bruker UHPLC Elute Plus a jeho integrace s hmotnostním spektrometrem TimsTOF Pro 2, cca 8 hodin
Zaškolení certifikovaným servisním technikem, cca 8 hodin.

10. #3P-A Doprava a pojištění

Balení a doprava včetně pojištění systému při dopravě

Metabolomický software

11. #1878412 MetaboScape/TASQ Workstation

MetaboScape

je plně integrované SW řešení na bázi klient/server architektury umožňující necílenou analýzu v oblastech Metabolomiku, Phenomiku, Exposomiku, Lipidomiku, fluxomiku s využitím srážkových průřezů (Collision Cross-Section, CCS).

Hlavní vlastnosti:

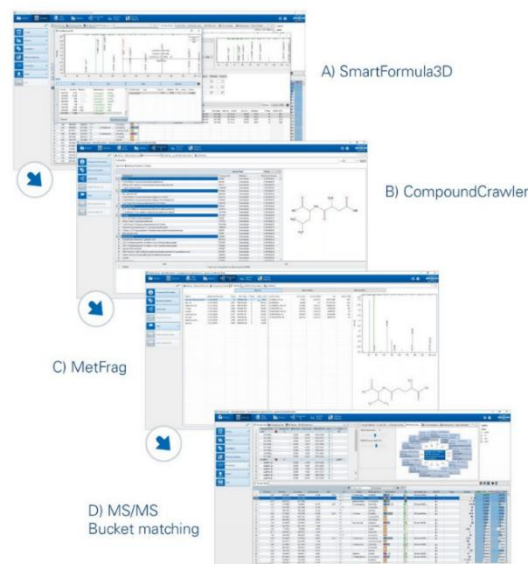
Software MetaboScape poskytuje all-in-one funkce pro hledání, identifikace, časové řady, vyhodnocování a statistikou analýzu necílených dat získaných na hmotnostních spektrometrech společnosti Bruker typu LC-QTOF-MS, LC-TIMS-MS, LC-MRMS, MALDI-MRMS a MALDI-TIMS-MS. MetaboScape podporuje také aplikační řešení SpatialOMx kombinující software MetaboScape a SciLS Lab a nabízí jedinečnou anotaci funkcí CCS-Aware (metabolity léčiv, lipidy, glykany) pro zobrazení molekulových tkání MALDI. SciLS Lab je prodáván odděleně.

MetaboScape je kvalitativní software umožňující automatickou kalibraci přesné hmoty, extrakci unikátních MS, MS/MS, CCS a RT informací pro všechny analyty s ohledem na izotopy, adukty a fragmenty, zarovnání jejich retenčních časů pro statistické zpracování, interaktivní vizualizaci a statistické vyhodnocení metodami PCA, t-test, ANOVA, PLS.

Software umožňuje automatickou identifikaci známých analytů na základě uživatelských databází včetně CCS hodnot a pro neznámé látky automatické generování sumárních vzorců na základě přesné hmoty a izotopické obálky. MetaboScape obsahuje také modul pro predikci CCS hodnot na základě strukturního vzorce analytů.

Pro zjednodušení identifikace známých analytů podporuje SW MetaboScape knihovny spekter Bruker MetaboBASE® Personal Library, Bruker HMDB Metabolite Library, Bruker Sumner MetaboBASE a knihovnu NIST 2020. Knihovny se prodávají samostatně.

Software může využívat přímý přístup do internetových databází Chempidder, ChEBI, PubChem apod.

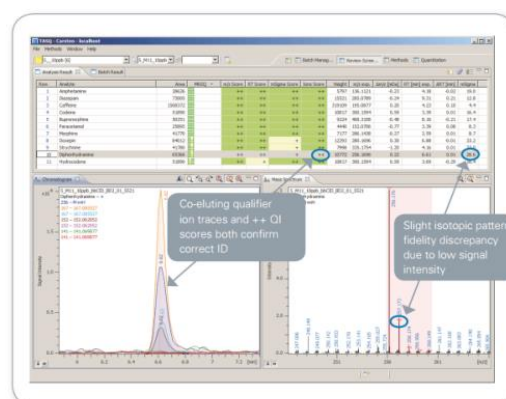


TASQ

je klient/server řešení pro screening a kvantifikaci na základě dat změřených na hmotnostních spektrometrech společnosti Bruker.

Hlavní vlastnosti:

Screening velkého počtu analytů, pro každý definujete více iontů analyt včetně poměrů intenzity, zobrazení více chromatografických pohledů současně, kontrola výsledků každé analýzy nebo analytu nebo pro všechny šarže, vylepšená podpora pro vývoj metod (přenos analytu z jedné metody do druhé), indikace interferujících analytů, současně zobrazení všech relevantních informací.



Software TASQ vyhodnocuje analýzy na základě známých informací jako jsou sumární vzorec, přesná hmota, shoda isotopického profilu, RT, CCS a fragmenty získané pomocí MS a MS/MS měření (řádově stovky až tisíce analytů), včetně sledování metabolických drah a kvantifikace.

Základní kvantifikační schopnosti:

Standardní kalibrační funkce (lineární, kvadratické, kubické), jednoduchá bodová kalibrace, použití vnitřních standardů, podporované typy vzorků zahrnují blank, vzorek, kalibrátor, kontrola kvality. Možnost využití starších kalibračních funkcí z dříve zpracovaných sekvencí. Reportování s předdefinovanými reporty. Podpora QC analýz.

Zahrnuje: Tři plovoucí licence pro MetaboScape a tři plovoucí licence pro TASQ.

12. #8262110 Display, LCD-wide screen BRUKER Standard

Bruker Standard LCD wide-screen monitor, úhlopříčka 24'', full HD, rozšíření počtu monitorů pro vyhodnocovací PC na 2 monitory



13. #DAL00973 Zaškolení online 3 dny

Pokročilé aplikační zaškolení na software MetaboScape a TASQ aplikačními specialisty z demonstrační laboratoře výrobce. Školení je poskytnuto v anglickém jazyce.

Školení je možno čerpat po polovinách dne. Jeden den je 6 hodin školení, polovina dne 3 hodiny školení.

Metabolomické knihovny

14. #1867359 Library MS-MetaboBase 3.0

Uživatelská knihovna Bruker MetaboBASE 3.0 – byla vytvořena ve spolupráci s profesorem Gary Siuzdakem z The Scripps Center for Metabolomics, La Jolla, Kalifornie, USA.

Knihovna nyní obsahuje MS/MS spektra z více než 100 000 sloučenin pro identifikaci endogenních metabolitů a také pesticidů, léčiv a dalších chemických entit. Data pro Bruker MetaboBASE Personal Library 3.0 byla získána ze syntetických nebo izolovaných standardů odvozených ze známé knihovny sloučenin METLIN™ (METLIN je ochranná známka The Scripps Research Institute.)



MetaboBASE Personal Library
BRUKER Daltonics

Molekulární standardy pro knihovnu byly měřeny v pozitivním i negativním ionizačním módu při více srážkových energiích a všechna data byla ručně upravena. K doplnění spektrálních dat jsou poskytovány další informace. To zahrnuje InChI, SMILES a CAS identifikátory a synonyma pro většinu látek; ID databáze; a hypertextové odkazy na externí databáze, včetně HMDB a PubChem.

Tato verze knihovny také obsahuje ~ 700 000 in-silico generovaných MS/MS spekter pro více než 233 000 sloučenin. To umožňuje předběžně identifikovat relevantní cíle, které ještě nejsou k dispozici jako čisté referenční standardy. (Poznámka: tato in-silico generovaná knihovna je kompatibilní pouze pro použití s MetaboScape 4.0 a vyšší).

Celkový počet analytů: 333 696

15. #1859793 Bruker HMDB Metabolite Library 2.0

Bruker HMDB Metabolite Library 2.0 usnadňuje identifikaci metabolitů v (lidském) metabolickém výzkumu. Knihovna je umístěna na vašem PC a obsahuje více než 6000 MS a MS/MS spekter a také metainformace z >800 referenčních standardů. Sloučeniny byly vybrány z Human Metabolome Data Base HMDB (<http://www.hmdb.ca/>) a jsou složeny z metabolitů nalezených v moči, krvi, jiných biotekutinách a buněčných extraktech.

Data pro každý metabolit byla získána na hmotnostním spektrometru Bruker Impact Series QTOF s vysokým rozlišením s průtokovou injekční analýzou s použitím různých srážkových energií (CE) 10, 20, 30, 40 eV a 20-50 eV. V závislosti na ionizačním chování byly metabolity měřeny v ESI pozitivním, negativním nebo obou režimech. Všechna spektra byla manuálně zkontrolována, aby se odstranila hlučná spektra a také píky kontaminantů. Hmotnosti prekursoru a fragmentového iontu byly opraveny tak, aby odpovídaly teoretickým hodnotám hmotnosti a rozložení izotopových vzorů. Molekulární vzorce a struktury fragmentových iontů byly ručně přiřazeny fragmentovým iontům ve vybraných spektrech.

Meta informace přidávané do knihovny zahrnují InChI, SMILES, CAS ID, Synonyma, stejně jako databázová ID a hypertextové odkazy na HMDB, PubChem, ChemSpider, ChEBI, BioCyc a další.

Tato knihovna byla vytvořena ve spolupráci s Prof. Liangem Li a Prof. Davidem Wishartem a jejich týmy na University of Alberta a je exkluzivně poskytována společností Bruker.

Pro > 600 metabolitů jsou uvedeny retenční časy (v seznamu analytů). Tyto informace lze použít při řešení |T-ReX LC-QTOF| pracovní postup se provádí. Patří sem např. Bruker Elute UHPLC, Bruker T-Rex Elute M-column kit: RP, vyhrazené podmínky LC, MetaboScape, a je popsán v návodu řešení T-ReX LC-QTOF.

Celkový počet analytů: 824

16. #1880713 Bruker NIST 2020 MS/MS Spectral Library

Spektrální knihovna |Bruker NIST 2020 MS/MS| je produktem Národního institutu pro standardy a technologie (NIST), redistribuovaný společností Bruker. Tento produkt obsahuje knihovnu malých molekul NIST Tandem Mass Spectral Library a program NIST Mass Spectral Search Program.

Tandemová hmotnostní spektrální knihovna malých molekul NIST obsahuje 1 320 389 spekter 185 608 prekursorových iontů z 30 999 chemických sloučenin.

Vedle původního vyhledávače od NIST je knihovna MS/MS s vysokou rozlišovací schopností (HRAM) s vysokou rozlišovací schopností malých molekul naformátována ve formátu specifickém pro Bruker, aby byla přímo čitelná softwarem MetaboScape 2021 a vyšším a DataAnalysis a příslušným editorem knihovny DataAnalysis. , verze 5.2 a vyšší. Tato knihovna obsahuje 27840 sloučenin a 1021914 MS/MS spekter.



HMDB Metabolite Library
BRUKER Daltonics



NIST Library
BRUKER Daltonics

Vyjádření k dokumentu "Obecné podmínky pro dodávku přístrojů"

V současnosti dodává naše společnost operační systém Windows 10 LTSC s podporou do 01/2032. Společnost Microsoft představila verzi Windows 11 LTSC teprve koncem loňského roku a není tedy chybou dodavatelů pokročilých systémů vyžadujících stabilitu operačního systému, že stále používají Windows 10LTSC. Přejít na Windows 11 LTSC bude vyžadovat testování a oficiální přechod na Windows 11 LTSC se očekává nejdříve v roce 2026.

V rámci dodávky je požadován pokročilý software pro zpracování dat s klient/server architekturou. Naše společnost podporuje antivirový program Windows/Microsoft defender a zapnutý firewall. Máme velmi špatné zkušenosti s programem Avast, který zasahuje do funkcí programů a má komplikovanou konfigurovatelnost pro běh našeho software. Naše společnost nedoporučuje použití programu Avast Business na akvizitním nebo vyhodnocovací datastanci.