

## Leistungsbeschreibung/Ausschreibungsinformationen

Vorhaben: hochauflösendes Massenspektrometer inkl. Flüssigchromatograph  
Vergabenummer: INP-31-2017

Auftraggeber: Leibniz-Institut für Plasmaforschung  
und Technologie e.V.  
Felix-Hausdorff-Straße 2  
17489 Greifswald  
Germany

### Zweck der Anschaffung:

Im Rahmen der weiteren Entwicklung des Zentrums für Innovationskompetenz plasmatis (ZIK plasmatis) soll für die Gruppe Plasma-Flüssigkeitseffekte ein Hochleistungs-massenspektrometer für Lipidomics/Metabolomics-Untersuchungen angeschafft werden. Die Nutzung im Rahmen von ZIK plasmatis Forschungsprojekten stellt höchste Ansprüche bezüglich Flexibilität, Sensitivität und Probendurchsatz an das Gerätesystem, da vor allem folgende Anwendungen vorgesehen sind:

- hochsensitives, hoch reproduzierbares und umfassendes Screening von Proben aus Körperflüssigkeiten (z. B. Wundflüssigkeit, Blutplasma) oder experimentellen Proben mit dem Ziel Biomarkerscreening
- Analysen von humanen Gewebeproben, die zum Teil nur in geringen Mengen vorliegen, zur Aufklärung pathophysiologischer Vorgänge und von Mechanismen der Kaltplasma-Gewebe-Interaktion
- Absolute Quantifizierung von Proben zur Aufklärung von Mechanismen und für systembiologische Ansätze im Rahmen von Zellkultur- bzw. Tiermodellen

Technische Spezifikationen (*So detailliert wie möglich, aber keine bewusste Schlüsselung auf einen Anbieter*):

Benötigt wird ein modulares System, bestehend aus UHPLC und Hochleistungsmassenspektrometer zur Aufnahme hochqualitativer MS- bzw. MS/MS-Spektren mit hohem Informationsgehalt, die sowohl zur Identifizierung als auch Quantifizierung von Lipiden, kleinen Molekülen, oder Peptiden geeignet sind. Insbesondere sind höchste Sensitivität und Reproduzierbarkeit, hohe Massenauflösung und -genauigkeit sowie die Fähigkeit zur Quantifizierung über einen weiten Konzentrationsbereich gefordert.

Vorstandsmitglieder  
Prof. Klaus-Dieter Weltmann (Vorsitz)  
Jens Berger (Admin)

Telefon + 49 3834 554 300  
Fax + 49 3834 554 301  
E-mail [welcome@inp-greifswald.de](mailto:welcome@inp-greifswald.de)  
web [www.inp-greifswald.de](http://www.inp-greifswald.de)

Bank Sparkasse Vorpommern  
IBAN DE49 1505 0500 0233 0003 72  
BIC-Code NOLADE21GRW  
Steuer-Nr. 084/141/11875  
VAT Nr. DE137584418  
Vereinsregister Greifswald VR 0323

Zusätzlich muss es möglich sein, Proben mittels reproduzierbarer Verfahren direkt in das Massenspektrometer zu infundieren (shotgun-approach).

Erforderlich sind weiterhin etablierte Workflows für die Detektion von Lipiden/kleinen Molekülen und deren Kompatibilität mit für die Auswertung zur relativen und absoluten Quantifizierung notwendigen Softwarepaketen, die durch den Anbieter selbst zur Verfügung gestellt werden können oder üblicherweise in der Forschung verwendet werden.

Spezifische Anforderungen an das Gerät  
(Mindestanforderungen):

- Hohe Massenauflösung von  $\geq 50.000$  (FWHM), wenn technisch möglich  $> 150.000$  („enhanced resolution mode“), und 1 ppm Massengenauigkeit (RMS)
- Massenbereich (mindestens):  $50 < m/z < 6.000$
- Scan-Funktionen: Full Scan, (Time Scheduled) MRM, Data-Independent-Acquisition (DIA) und datenabhängige Scans (DDA),
- Hohe Messfrequenz, mindestens jedoch 12 Hz
- Massenfilter mit  $\leq 0.5$  Da Präzision für die gezielte Isolierung von Vorläuferionen
- hohe Sensitivität: S/N 1:100 oder besser bei  $2 \times 10^{10}$  Analytmolekülen/s
- effiziente aber robuste Ionentransmission mit geringer Wartungsanfälligkeit
- Tandem-Massenspektrometer: collision induced dissociation muss für alle Präkursor-Ionen möglich sein (all ion fragmentation), Aufnahme von MS/MS – Daten für die Strukturaufklärung
- Externe oder interne Kalibriermöglichkeit für höchste Massengenauigkeit
- Geräte-eigene Elektrospray-Ionenquelle (z.B. für die Kalibrierung), robust & hochempfindlich
- State of the art-UHPLC zur reproduzierbaren Trennung von komplexen Analytengemische (z.B. Autosampler mit variablem Injektionsvolumen, Säulenofen, Pumpenmodul incl. Degasser, Loading-Pump und entsprechender Ventilsteuerung zur Nutzung einer trapping column), Starter-Kit (alle notwendigen Materialien, z.B. geeignete Trennsäule), „capillary flow“, mindestens 800bar
- Zusätzliches, externes Elektrospray-Interface für die Ionengenerierung (ESI): möglichst computergesteuerte, Chip-basierte nano-Spray-Quelle mit automatischer Spraykontrolle, individuellen Silizium-Emitter-Tips und Möglichkeiten zur Kollektion von Fraktionen für hochreproduzierbare Analysen (incl. ggf. notwendiger Software/Hardware), auch verwendbar für die direct infusion für die Shotgun-Lipid-Analytik. Quelle soll Fähigkeit zur punktuellen Beprobung/Extraktion von Gewebeschnitten oder anderen geeigneten Oberflächen enthalten.
- Kopplung von UHPLC mit dem Massenspektrometer mit der Fähigkeit zur Steuerung der HPLC durch den Steuerrechner des Massenspektrometers
- Robuster 24/7 Steuerrechner (Win7 oder höher) incl. RAID-System zur sicheren Datenspeicherung und up-to-date GUI, erforderliche Peripherie (u.a. 27“ Monitor)

**Anforderungen an mitzuliefernde Datenanalysesoftware:**

- Auswertung von Probenserien (ggf. unter Nutzung chromatographischer Informationen)
- Datenauswertung mit Ziel der absoluten bzw. relativen Quantifizierung
- Datenauswertung mit dem Ziel der Identifikationen von Substanzen (Datenbank, Strukturauflösung über Fragmentationsmuster)
- Analysen mit Data-Independent-Acquisition (DIA) und Data-Dependent-Acquisition (DDA) zur labelfreien Quantifizierung
- Co-detektion aller Features/Ionen mit Isotopenprofil einer Probenserie durch die Software für nachfolgende Suche dieser Feature in den individuellen Läufen erwünscht
- Option der Auswertung von Datenfiles verschiedener Instrumente/ Hersteller erwünscht (mzML, sowie Datenfiles von Agilent, Thermo, Waters, Bruker und AB Sciex)
- Leistungsstarke Workstation incl. erforderliche Peripherie (u.a. 27“ Monitor)

**Ausschlusskriterien:**

Eine Probenvermessung (2 Proben, Kontrolle & behandelt, humane Zelllinie, Lipid-Extrakt) ist Bestandteil der Ausschreibung. Die Ergebnisse (Vermessungsprotokoll) gehen in die Bewertung und die Ermittlung des Zuschlages ein. Die Proben können unter folgender Adresse angefordert werden: [inp-einkauf@inp-greifswald.de](mailto:inp-einkauf@inp-greifswald.de).

Die Geräte müssen betriebsbereit am Installationsort mit gründlicher Einweisung übergeben werden.

**Optionale Anforderungen an das Gerätesystem:**

- Messung der Ionenmobilität als zusätzlicher Parameter zur Identifikation isobarer Verbindungen (z. B. mittels internem Modul)
- Zusätzliche Fragmentierungsmöglichkeiten um zusätzliche Strukturinformationen zu erhalten (z.B. ETD-Fragmentierung)
- UHPLC: UV-Detektor mit passender Durchflusszelle
- Geeigneter Stickstoffgenerator (8bar ölfreie Druckluft hausseitig vorhanden)

Leistungen die neben der Lieferung durchzuführen sind:

- Instandhaltung
  - Einweisung
  - Installation
  - Sonstiges
- 24 Monate Gewährleistung;  
Wartung der Geräte bis 01/2022 (als Anlage)

Zuschlagskriterien:

siehe Anlage Zuschlagskriterien und Bewertungsmatrix

Sonstiges:

Bei Unklarheiten und Widersprüchen ist vor Abgabe des Preisangebotes Rücksprache mit dem AG (Ansprechpartner: Rosemarie Knospe; [inp-einkauf@inp-greifswald.de](mailto:inp-einkauf@inp-greifswald.de)) zu nehmen.

Bieterfragen werden bis zum 01.09.2017 beantwortet.

**Angebot:**

|                            |            |     |
|----------------------------|------------|-----|
| <b>Summe Angebot</b>       | netto:     | EUR |
| inkl. mgl. Rabatt          | -----      |     |
| (vom Anbieter auszufüllen) |            |     |
|                            | 19 % MwSt: | EUR |
|                            | -----      |     |
|                            | brutto:    | EUR |
|                            | =====      |     |

**Voraussichtliches Lieferdatum**  
(vom Anbieter auszufüllen) -----

|                      |            |     |
|----------------------|------------|-----|
| <b>Summe geprüft</b> | netto:     | EUR |
| (vom Auftraggeber    | -----      |     |
| auszufüllen)         |            |     |
|                      | 19 % MwSt: | EUR |
|                      | -----      |     |
|                      | brutto:    | EUR |
|                      | =====      |     |

\_\_\_\_\_  
**Ort /Datum**

\_\_\_\_\_  
**Unterschrift  
Firmenstempel**