



ISTITUTO AGRARIO  
DI SAN MICHELE ALL'ADIGE



**CENTRO RICERCA E INNOVAZIONE**

Prot. n. 0009873 ..... / GG / ee ..

San Michele a/A, 19 GIU. 2019

**Oggetto:** affidamento della fornitura, installazione, avvio al funzionamento di un sistema UHPLC-MS/MS triplo quadrupolo - trappola lineare.

**Documento di progettazione in unico livello – art. 3, comma 1 della L.P. 2/2016 e art. 23, comma 14 del d.lgs. 50/2018. – CUP C49H18000000001.**



*Investiamo nel vostro futuro*

**Sommario**

1. Relazione tecnico-illustrativa con riferimento al contesto in cui è inserita l'esigenza di approvvigionamento .....	2
1.1 Informazioni generali .....	2
1.2 Descrizione dei beni .....	4
1.2.1 Requisiti tecnici di unicità del sistema in acquisto .....	4
1.3 Criterio di scelta del contraente .....	5
1.4 Requisiti di ammissione alla procedura di affidamento .....	5
1.5 Indicazione progettisti/collaboratori .....	5
2. Indicazioni e disposizioni per la stesura dei documenti inerenti la sicurezza di cui all'articolo 26, comma 3, del decreto legislativo 9 aprile 2008, n. 81 .....	6
3. Calcolo degli importi necessari per l'approvvigionamento con indicazione degli oneri della sicurezza non soggetti a ribasso .....	6
4. Prospetto economico degli oneri complessivi necessari per l'approvvigionamento .....	6
5. Capitolato speciale descrittivo e prestazionale/specifiche tecniche .....	7
6. Schema di contratto .....	9



## 1. Relazione tecnico-illustrativa con riferimento al contesto in cui è inserita l'esigenza di approvvigionamento

### 1.1 Informazioni generali

Il Centro Ricerca ed Innovazione (Dipartimento Qualità Alimentare e Nutrizione ) della Fondazione Edmund Mach (d'ora innanzi FEM) ha la necessità di acquisire un **sistema UHPLC-MS/MS triplo quadrupolo - trappola lineare**.

La Giunta provinciale, con deliberazione n. 1412 del primo settembre 2017, ha approvato l'avviso n. 5/2017 "Sostegno alle infrastrutture di ricerca" – Programma operativo 2014-2020 FESR obiettivo "Investimenti a favore della crescita e dell'occupazione" - Asse 1 "Rafforzare la ricerca, lo sviluppo tecnologico e l'innovazione" - Azione 1.1.1 "Sostegno alle infrastrutture della ricerca considerate critiche/cruciali per i sistemi regionali".

La FEM, in data 5 ottobre 2017, ha sottoposto la domanda di finanziamento del progetto intitolato "Integrazione di piattaforme high throughput applicate all'agricoltura, alla nutrizione ed all'ambiente: raccogliere i frutti delle tecnologie "omiche" (acronimo: "FRUITOMICS").

L'obiettivo del progetto è stato così descritto: "creare un'infrastruttura di ricerca di eccellenza a sostegno della ricerca, dell'innovazione e dell'alta formazione nei settori delle scienze degli alimenti, della nutrizione, dell'agricoltura moderna e sostenibile e dell'ambiente. Fruitomics accrescerà la visibilità internazionale di FEM e dello STAR, grazie alla combinazione di diverse specializzazioni in un'ottica di multidisciplinarietà e traslationalità. Capace di generare nuova conoscenza, integrerà ricerche ora frammentate nei differenti settori dentro nuove prospettive tematiche coese. Il potenziamento dell'IR a sostegno della progettualità renderà possibile la fusione di conoscenze ed idee multidisciplinari verso la soluzione di obiettivi di ricerca complessi, che richiedano tra i pilastri centrali esperimenti di metabolomica e tracciabilità, nutrizione e nutrigenomica, biologia computazionale e fenotipizzazione. L'impatto del progetto sulla società e le imprese verrà assicurato dalla creazione di partnership con stakeholders locali e nazionali, fornendo consulenza scientifica, supporto tecnico e collaborazioni a progetti comuni di R&S in ambito nazionale ed internazionale. Puntando al rafforzamento delle capacità esistenti e delle sinergie con gli altri attori dello STAR, verranno evitate duplicazioni di attività e acquisto di strumentazioni già presenti".

**Con determinazioni n. 294 di data 22 dicembre 2017, n. 6 di data 17 gennaio 2018 e 29 di data 21 febbraio 2018 il Servizio istruzione e formazione del secondo grado, università e ricerca ha approvato la graduatoria prevista dall'avviso 5/2017 finanziando, tra l'altro, la proposta progettuale "FRUITOMICS" presentata dalla FEM.**

**L'acquisizione in oggetto è quindi realizzata nell'ambito del Programma Operativo FESR 2014 - 2020 della Provincia autonoma di Trento (WP1).**

**Obiettivo "Investimenti a favore della crescita e dell'occupazione" - Asse 1 "Rafforzare la ricerca, lo sviluppo tecnologico e l'innovazione" - Azione 1.1.1 "Sostegno alle infrastrutture della ricerca considerate critiche/cruciali per i sistemi regionali" - Avviso n. 05/2017 "Sostegno alle infrastrutture di ricerca" – CUP C49H1800000001.**

La strumentazione sarà ospitata presso il Laboratorio di Metabolomica del Dipartimento Qualità Alimentare e Nutrizione del Centro Ricerca e Innovazione della Fondazione Edmund Mach (CRI-FEM). L'Unità di Metabolomica è una struttura di base progettata per mediare il progresso scientifico attraverso lo sviluppo di nuovi metodi di metabolomica basati sulla spettrometria di massa e la fornitura di servizi di misura high-throughput applicabili a piante, esseri umani, animali, modelli cellulari. Le attività comprendono sia la profilazione (analisi di tutti gli analiti misurabili per identificare le differenze) sia le analisi mirate (quantificazione di un gruppo scelto di analiti). Questo laboratorio ha le competenze e gli strumenti (attualmente 10 sistemi MS, pienamente operativi 24/7) per fornire un supporto metabolomico di alta qualità agli studi di questo progetto, dallo sviluppo del metodo/validazione, alla gestione FAIR dei dati, elaborazione dei dati, interpretazione e diffusione.



L'Unità di Metabolomica, inclusa in particolare la strumentazione in acquisto, fa parte inoltre di FRUITOMICS, una delle più importanti infrastrutture bioeconomiche del Trentino, a supporto dei settori agrozootecnico, alimentare e ambientale. La piattaforma, è stata identificata sia nel Piano Nazionale delle infrastrutture di ricerca, sia nel Programma di ricerca pluriennale della Provincia autonoma di Trento, con l'obiettivo di integrare e rafforzare le infrastrutture esistenti presso la FEM e collegare ad altre infrastrutture e cluster di ricerca nazionali e internazionali. Lavora sulle aree prioritarie di ricerca agroalimentare, qualità della vita, energia e ambiente, stabilendo in un unico sito l'accesso a competenze specialistiche e scienze omiche, operando in sinergia con altre infrastrutture di ricerca STAR (Sistema Trentino Alta Formazione e Ricerca). I ricercatori e tecnici dell'Unità Metabolomica, inclusi gli utilizzatori afferenti ad altri reparti ed al C3A, hanno esperienza pluriennale sia nella partecipazione come PI a progetti europei nel settore della metabolomica nutrizionale (ENPADASI, FOOTBALL, HEALTHMARK) che nella ricerca industriale.

L'attrezzatura deve sostenere tramite FRUITOMICS un portafoglio di ricerca prioritaria di alta qualità, sia sui progetti di ricerca esistenti che in quelli futuri. Deve inoltre aumentare la flessibilità, introducendo la possibilità di condurre esperimenti che richiedano l'uso simultaneo del *profiling* metabolico in MRM associato all'annotazione strutturale basata sugli alberi di frammentazione fino alla MS<sup>3</sup><sup>[1]</sup>. Fa parte del gruppo di attrezzature che aumentano la capacità sia in termini di coprire nuovi tipi di esperimenti e nuove classi di composti sia in termini di numero di campioni processabili.

FRUITOMICS intende praticare ed incoraggiare la cultura della condivisione delle strumentazioni e dei dati del sistema STAR al fine di massimizzare l'utilizzo e le ricadute sia all'interno della istituzione ospitante, che attraverso una ampia rete di partner pubblici e privati. Il laboratorio di metabolomica pratica la condivisione organizzata degli spettrometri con un valore  $\geq 100.000$  euro, con registrazione sistematica degli accessi. Vi è di norma una separazione tra i laboratori chimici dedicati ad ospitare le strumentazioni ed a generare i dati, dagli uffici dove i dati prodotti vengono elaborati da una comunità di utenti diffusa anche esternamente al Dipartimento Qualità Alimentare e Nutrizione QAN. Sia il *software* che i dati prodotti sono di norma ospitati presso un server dedicato, localizzato presso il Centro di Calcolo della FEM. I dati che sostengono pubblicazioni di ricerca vengono di norma resi disponibili su data base aperti, previa soluzione di eventuali problemi legali e di IP. In questo contesto, è essenziale che i dati possano essere resi accessibili in un formato aperto idoneo per essere ospitato sulle *repositories* internazionali.

La Metabolomica si avvale di un sistema di *booking online*, accessibile agli analisti accreditati (sviluppatore, utilizzatore autonomo, utilizzatore da assistere). Le strumentazioni sono impostate per lavorare 24/7. Il responsabile di struttura gestisce le richieste, tenendo conto delle priorità dettate dalle scadenze contrattuali e scientifiche ed individua il tecnico responsabile per affiancare ciascun processo. Questo tipo di organizzazione, che prevede lo svolgimento di attività progettualizzate con tempi di rilascio spesso cogenti, necessita di un programma di copertura *full-risks* con tempi di risoluzione dei problemi adeguati.

FRUITOMICS intende potenziare attivamente le sinergie con altri progetti FESR proposti dal territorio, proponendosi con i propri servizi avanzati per la ricerca industriale finanziata da FESR e integrandosi con altri interventi e con gli enti di ricerca del territorio.

Il potenziamento del Laboratorio di Metabolomica si integra con la realizzazione in FEM di un'infrastruttura per la conservazione, l'analisi e visualizzazione dei dati -omici prodotti all'interno dell'IR. Essa dovrà soddisfare i seguenti requisiti:

- a) avere una struttura modulare suscettibile di aggiornamento/espansione;
- b) prevedere un sistema integrato di tracciabilità che dovrà gestire l'intero ciclo di vita dei dati sperimentali uniformandosi alle best practices di standardizzazione definite a livello europeo;
- c) essere in grado di gestire un ampio spettro di compiti computazionali, da quelli massicciamente paralleli a quelli che necessitano di grandi quantità di RAM dedicata.

L'infrastruttura verrà servita da uno *storage* massivo per l'archiviazione dei dati e da uno storage parallelo in grado di garantire alta intensità di I/O. Il *filesystem* garantirà l'accessibilità trasparente dei dati da tutte le risorse di calcolo. *Hardware* e *software* che gestiscono il processamento dei dati prodotti dalla strumentazione in acquisto devono potersi integrare in questo sistema delocalizzato, mentre il solo software

<sup>1</sup>Spettrometria di massa in più stadi, nel caso specifico 3.



di gestione dello strumento ed acquisizione del dato, ed i *tools* per il controllo di qualità durante la sequenza di acquisizione, possono essere gestiti in locale.

## 1.2 Descrizione dei beni

L'appalto ha ad oggetto l'affidamento della fornitura, installazione, avvio al funzionamento (nella formula "chiavi in mano") e servizi connessi di un **sistema UHPLC-MS/MS triplo quadrupolo - trappola lineare**.

Nello specifico lo spettrometro ibrido in acquisto è un UHPLC-MS/MS triplo quadrupolo - trappola lineare, composto da un sistema di cromatografia liquida ad alta prestazione accoppiato ad uno spettrometro di massa del tipo ibrido triplo-quadrupolo trappola ionica, ad alta sensibilità, velocità e gamma dinamica, con *software* e accessori per la piena automazione. Configurato per l'analisi qualitativa e quantitativa di piccole molecole, quali ad esempio i metaboliti di fase II di composti naturali all'interno di studi di metabolomica nutrizionale, ed altri esperimenti che si avvalgono nell'annotazione degli alberi di frammentazione. Deve essere in grado di svolgere analisi quantitativa su un ampio range dinamico e con altissima sensibilità, rilevando il maggior numero possibile di metaboliti, compresi quelli presenti ad ultra tracce. Verrà impiegato con matrici molto varie, che spaziano dagli alimenti e in generale da estratti vegetali, fino ai biofluidi umani.

Questo sistema sarà dedicato in particolare all'analisi di matrici difficili, per le quali sia necessario diluire il campione per limitare le contaminazioni della sorgente, o per le quali sia necessario monitorare analiti in tracce inferiori alle ppb<sup>2</sup>, non accessibili a strumentazioni di classe media di sensibilità. E' richiesta la capacità di rilevazione anche di composti incogniti non separati cromatograficamente, che devono essere caratterizzati e identificati da complesse matrici biologiche attraverso esperimenti di metabolomica. Il sistema deve essere ad elevata processività, pienamente automatizzabile, di elevata robustezza ossia idoneo alla iniezione seriale di campioni da matrici complesse (sia vegetali che biologiche) mantenendo una risposta stabile, ed equipaggiato con efficienti sistemi sia per la messa a punto dei metodi quanto per il processo, il controllo di qualità e l'analisi statistica sui dati analitici.

### 1.2.1 Requisiti tecnici di unicità del sistema in acquisto

Viste le esigenze dell'Unità di Metabolomica è stata effettuata un'indagine conoscitiva volta a verificare l'esistenza sul mercato della strumentazione necessaria a soddisfarle, ad identificare dei possibili operatori economici in grado di offrirla e a calcolare l'importo stimato di spesa.

Seppur in una prima fase sembrava prefigurarsi la possibilità di acquistare la strumentazione in oggetto tramite una procedura aperta alla partecipazione di più operatori economici, in seguito di tale indagine è risultato che l'unico strumento in grado di soddisfare le particolari esigenze dell'Unità di Metabolomica del CRI, è lo spettrometro ibrido prodotto e brevettato in esclusiva dall'operatore economico SCIEX Pte Ltd per le ragioni nel proseguo indicate.

Le altre strumentazioni attualmente presenti sul mercato e le relative tecnologie non sono infatti risultate in grado di garantire appieno le esigenze espresse dall'Unità di Metabolomica CRI. La strumentazione in acquisto è pertanto da ritenersi infungibile oltreché coperta, nelle funzionalità utilizzate dall'Unità di Metabolomica CRI, da specifici brevetti.

Nell'ambito del progetto FRUITOMICS è già stata acquistata, per le medesime ragioni di natura tecnica, una strumentazione analoga seppur con una configurazione più complessa e costosa (lo strumento già acquistato è dotato anche di mobilità ionica e *software* specifico per la lipidomica). In fase di primo utilizzo di tale strumentazione si è accertata la sua capacità di rispondere in maniera esclusiva, benché con una configurazione diversa, anche alle esigenze poste alla base dell'acquisto in oggetto. La soluzione infatti si presta per combinare l'analisi quantitativa di composti in tracce tramite separazione LC accoppiata ad uno spettrometro tandem (tecnologia prodotta da svariati produttori) con l'analisi qualitativa attraverso l'annotazione dei composti in base alla possibilità di frammentare fino a MS<sup>3</sup> nella trappola lineare (tecnologia proprietaria - SCIEX Pte Ltd). Tale elemento risulta fondamentale per le esigenze espresse dall'Unità di Metabolomica CRI.

<sup>2</sup> ppb: Sigla di parts per billion («parti per miliardo»)



Nel dettaglio lo spettrometro ibrido in acquisto è prodotto e brevettato in esclusiva dall'operatore economico SCIEX Pte Ltd, ed ha molteplici caratteristiche di unicità, non riscontrate dagli altri produttori. Il più importante è che lo spettrometro è costituito da un analizzatore a triplo quadrupolo accoppiato ad una trappola ionica lineare. La tecnologia impiegata permette di ottenere la piena sinergia dei due analizzatori accoppiati, realizzando, in un solo sistema, uno strumento idoneo all'analisi seriale quantitativa, tipica dei tripli quadrupoli, combinata ad un potente strumento per l'analisi qualitativa, ossia l'identificazione dei composti tramite alberi di frammentazione, tipico della trappola ionica lineare. La combinazione di questi due analizzatori insieme, permette di generare esperimenti combinati, non accessibili a configurazioni alternative.

In particolare lo strumento deve soddisfare tutti i requisiti base per poter eseguire determinazioni quantitative di sostanze presenti in un ampio range dinamico, incluse le sostanze in tracce, in modalità MRM (*multiple reaction monitoring*), integrate con le funzioni di scansione della trappola ionica lineare, quali EMS seguito da MS/MS data dependent e MRM<sup>3</sup>.

La modalità EMS si rivela particolarmente interessante nell'ambito *untargeted*<sup>3</sup> e nella annotazione dei metaboliti e per supportare la ricerca qualitativa di migliaia di sostanze potenzialmente presenti, basata sulla tecnologia QTRAP, acquisendo in modo automatico lo spettro di MS/MS da confrontare con le biblioteche di spettri in dotazione allo strumento e con analoghe librerie esterne, al fine della annotazione strutturale. Inoltre, la modalità MRM<sup>3</sup> è essenziale per generare, previo isolamento del frammento prodotto in cella di collisione e ri-frammentazione nella trappola ionica, un albero di frammentazione che sostenga l'annotazione strutturale. Quest'ultima funzione risulta essenziale sia per migliorare il livello di confidenza nella assegnazione strutturale degli *untargeted*, quanto per la assegnazione strutturale di composti isobari in metabolomica.

In definitiva le ragioni "di natura tecnica" e quelle "attinenti alla tutela di diritti esclusivi" sono tali da impedire o comunque rendere assolutamente vano il ricorso ad una procedura di gara ordinaria.

### 1.3 Criterio di scelta del contraente

In forza dell'unicità della strumentazione (cfr. supra 1.2.1), la medesima può essere fornita unicamente da un determinato produttore economico (SCIEX Pte Ltd, tramite la Filiale italiana AB Sciex S.r.L.), si propone di aggiudicare l'appalto tramite procedura negoziata senza previa pubblicazione di un bando di gara, ai sensi dell'art. 63, comma 2, lettera b), punti 2 e 3 del d. lgs. 50/2016 (codice dei contratti pubblici).

### 1.4 Requisiti di ammissione alla procedura di affidamento

Oltre ai requisiti di ordine generale di cui all'art. 80 del d. lgs. 50/2016, si ritiene che per l'operatore economico SCIEX Pte Ltd e per l'operatore economico italiano controllato AB Sciex S.r.L., unici produttori e distributori dello spettrometro in oggetto, non sia necessaria la previsione e la comprova di specifici requisiti di capacità economica e finanziaria e di capacità tecniche e professionali.

### 1.5 Indicazione progettisti/collaboratori

Si riportano i riferimenti di tutti i soggetti che hanno collaborato alla redazione del presente documento di progettazione e della documentazione da questo richiamata:

Oggetto	Redazione	Controllo/Revisione	Approvazione
Documento di progettazione	Fulvio Mattivi	/	Anna Paola Rizzoli
Schema CSA – specifiche tecniche	Fulvio Mattivi	/	Anna Paola Rizzoli
Schema CSA - disciplina amministrativa	Giuseppe Gubert	Fabio Calliari Fulvio Mattivi	Anna Paola Rizzoli

<sup>3</sup> Analisi non mirata.



## 2. Indicazioni e disposizioni per la stesura dei documenti inerenti la sicurezza di cui all'articolo 26, comma 3, del decreto legislativo 9 aprile 2008, n. 81

La strumentazione in oggetto verrà collocata presso il laboratorio n. 435 del Centro Ricerca ed Innovazione – piano IV, ala est dell'edificio che ospita prevalentemente il Centro Istruzione e Formazione della FEM, in via E. Mach, 1 – 38010 San Michele all'Adige (TN).

Si tratta di strumentazione che viene realizzata esclusivamente "su ordinazione" e prevede una fase di produzione, presso gli stabilimenti dell'operatore economico individuato, della durata di circa 80 (ottanta) giorni decorrenti dalla data di ordinazione. La fase di consegna, installazione e avvio al funzionamento presso la FEM ha una durata di circa 10 (dieci) giorni. La fornitura, installazione e avvio al funzionamento deve essere quindi effettuata entro 90 (novanta) giorni naturali e consecutivi decorrenti dalla data di perfezionamento del contratto (o dalla data di avvio anticipato dell'esecuzione del contratto).

Tali indicazioni, unitariamente ad altre richieste, sono già state trasmesse alla dott.ssa Eleonora Rossi, Responsabile del Servizio di Prevenzione e Protezione (RSPP) della FEM, che ha redatto uno schema di Documento Unico per la Valutazione dei Rischi da Interferenze (DUVRI) e stimati in Euro 200,00 (duecento/00), al netto degli oneri fiscali, i costi per la sicurezza derivanti da rischi interferenziali.

## 3. Calcolo degli importi necessari per l'approvvigionamento con indicazione degli oneri della sicurezza non soggetti a ribasso

L'importo complessivo stimato dell'appalto è pari ad Euro **278.000,00 (duecentosettantottomila/00)**, al netto degli oneri fiscali e di cui Euro 200,00 (duecento/00), al netto degli oneri fiscali, i costi per la sicurezza derivanti da rischi interferenziali.

Tale importo è stato così stimato:

Voce	Importo (€)
1) Costo di reperimento/produzione dei beni	€ 247.218,75
2) Costo della manodopera (installazione, avvio al funzionamento, ecc.)	€ 7.000,00
3) Costo per servizi di garanzia, manutenzione preventiva e correttiva	€ 8.085,00
4) Costo delle altre prestazioni contrattuali (CSA)	€ 673,75
5) Spese generali	€ 1.347,50
6) Utile di impresa	€ 13.475,00
7) Costi per la sicurezza derivanti da rischi interferenziali, non soggetti a ribasso (individuati ai sensi dell'art. 23, comma 16 del d.lgs. 50/2016)	€ 200,00
<b>IMPORTO COMPLESSIVO (al netto degli oneri fiscali)</b>	<b>€ 278.000,00</b>

## 4. Prospetto economico degli oneri complessivi necessari per l'approvvigionamento

Si riporta un quadro complessivo degli oneri necessari per l'approvvigionamento:

Oneri	Importo
Importo stimato per l'approvvigionamento	€ 278.000,00
Costi legati alla procedura di individuazione del contraente	€ 1.600,00 per pubblicazione avviso affidamento
Contributo ANAC*	€ 225,00 (esente IVA)
Oneri fiscali – IVA	€ 61.512,00
<b>TOTALE</b>	<b>€ 341.337,00</b>
<b>Fonte di finanziamento – copertura finanziaria</b>	
<b>L'acquisizione in oggetto è quindi realizzata nell'ambito del Programma Operativo FESR 2014 -</b>	



2020 della Provincia autonoma di Trento (WP1).  
**Obiettivo “Investimenti a favore della crescita e dell’occupazione” - Asse 1 “Rafforzare la ricerca, lo sviluppo tecnologico e l’innovazione” - Azione 1.1.1 “Sostegno alle infrastrutture della ricerca considerate critiche/cruciali per i sistemi regionali” - Avviso n. 05/2017 “Sostegno alle infrastrutture di ricerca” – CUP C49H1800000001.**

#### 5. Capitolato speciale descrittivo e prestazionale/specifiche tecniche

Le caratteristiche tecniche minime dei beni richiesti (riportate anche nella parte II – specifiche tecniche dello schema di Capitolato speciale d’appalto – allegato 1) sono le seguenti:

a) SPETTROMETRO DI MASSA E POSSIBILITÀ DI INTERFACCIAMENTO CON SISTEMI CROMATOGRAFICI	
1) Sorgente e sistema di ionizzazione	electrospray (ESI) e APCI. La sorgente deve comprendere le interfacce di sistema per la completa integrazione nella configurazione LC-MS e la possibilità di infusione diretta controllata via <i>software</i> .
2) Spettrometro di Massa	ibrido, triplo quadrupolo - trappola ionica lineare
3) Linearità di risposta	almeno 4 ordini di grandezza a partire dal limite di rilevazione o superiore
4) Intervallo di Massa	non inferiore all'intervallo $\geq 30 - 2.000$ m/z, o superiore
5) Rilevatore	deve garantire l’ottenimento di picchi con eccellente definizione e accuratezza di massa
6) Risoluzione di Massa (m/Dm)	inferiore o uguale a 0,4 Dalton in modalità triplo quadrupolo e 0.05 Dalton in modalità trappola lineare
7) Accuratezza di Massa	0.1 Dalton nell’intero intervallo di masse coperto dallo strumento
8) Velocità di Scansione (spettri/s)	$\geq 20000$ amu/s in modalità trappola ionica e 12000 amu/s in modalità triplo quadrupolo
9) Stabilità di massa	drift minore di +/- 0.1 Dalton in 24 ore
10) Intervallo dinamico	non inferiore a 5 ordini di grandezza, preferibilmente superiore
11) Metodo di frammentazione	CID (collision-induced dissociation). L’energia di collisione deve essere controllata in modo digitale. Deve essere controllabile la pressione del gas di collisione. L’introduzione del gas di collisione deve essere completamente gestita dal sistema di controllo. La pressione del gas di collisione usata durante l’acquisizione dei dati deve essere automaticamente associata al file di dati salvato
12) Polarity switching	non superiore a 10 ms, preferibilmente più veloce
13) Sensibilità	requisito minimo: 100 femtogrammi di reserpina con S/N $\geq$ 50, mediante iniezione in colonna e misurato in modalità MRM positiva
14) interfacciamento con sistemi cromatografici	è richiesta la possibilità di interfacciare lo strumento con i più recenti sistemi cromatografici, e di controllarli dallo stesso software operativo
15) UHPLC	sistema binario completo e configurato per totale automazione e per assicurare le più elevate prestazioni separative con il minimo carryover. Possibilità di usare tecnologie compatibili con le colonne cromatografiche di più recente tecnologia con diametro costante <2 micron di dimensione delle particelle. a) Velocità di flusso: 0,0001 – 3 mL/min; b) Range di pressione: fino a 1300 bar; c) Alta precisione di flusso, +/- 0.06% RSD; d) Campionatore automatico programmabile termostabile (refrigerato, con deumidificatore) e capace di alloggiare sia vials che micropiastre, ottimizzato per micro volumi;



	e) Forno colonna termostabile (sia refrigerato fino a 4°C che riscaldato fino a 80°C).
16) Librerie spettrali proprietarie	la fornitura deve essere completa delle librerie spettrali a supporto dell'annotazione strutturale con la trappola lineare (lipidi, farmaci, pesticidi, micotossine)
17) Elementi migliorativi inclusi nella fornitura	sono considerati tali i sistemi addizionali rispetto alla configurazione minima, atti a migliorare la deconvoluzione di miscele complesse e ad estendere la versatilità del sistema, sistema di insonorizzazione delle pompe (Silent Box). Librerie spettrali in aggiunta di quelle del punto 16. Estensione del range di lavoro di pH fino a 14 dell'autocampionatore.
18) Elementi accessori non inclusi nella fornitura	quotazione della estensione della garanzia a 36 mesi.
<b>b) SISTEMA HARDWARE E SOFTWARE PER L'ACQUISIZIONE ED IL CONTROLLO STRUMENTALE</b>	
1) <b>HARDWARE</b>	<p>Deve essere fornito un Personal computer di classe "workstation" ad alta affidabilità adibito al ruolo di acquisizione dati, controllo strumentale, gestione dati ed elaborazione dei <i>report</i>. Le caratteristiche tecniche <i>hardware</i> sono riportate di seguito, e sono anch'esse da considerarsi requisiti tecnici minimi inderogabili.</p> <p>La <i>workstation</i> deve gestire il sistema di acquisizione dei dati e permettere un controllo dinamico dell'intero sistema (spettrometro e UHPLC compresi tutti gli accessori ed interfacce inclusi nella fornitura (autocampionatore, interfacce, forno colonna, ecc.).</p> <p>Deve avere una elevata capacità di memorizzazione dei dati grezzi acquisiti con idoneo livello di ridondanza dei supporti <i>hardware</i> a fronte di possibili guasti.</p> <p>Deve permettere inoltre di visualizzare simultaneamente l'acquisizione dati in tempo reale ed i parametri strumentali.</p> <p>Caratteristiche tecniche minime:</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>a) <b>Tipologia:</b> workstation tower;</li> <li>b) <b>Alimentazione:</b> duale ridondante;</li> <li>c) <b>CPU:</b> tipo Intel Xeon E5 v4 family o Intel Quadcore i7 sesta generazione;</li> <li>d) <b>RAM:</b> minimo 32GB;</li> <li>e) <b>Connettività LAN:</b> 2x NIC Gigabit Ethernet;</li> <li>f) <b>HD:</b> 2x min 2TB in RAID 1 (DATI) - 1x SSD min 256GB (SO e Applicativi);</li> <li>g) <b>Controller HD:</b> supporto e gestione livello RAID 1;</li> <li>h) <b>Scheda grafica:</b> dual port con risoluzione min. 1920x1080;</li> <li>i) <b>Monitor:</b> minimo 2 monitor dim. 27" (con entrata segnale compatibile con quella della scheda video workstation);</li> <li>j) <b>Tastiera e mouse:</b> inclusi;</li> <li>k) <b>Garanzia e assistenza:</b> del produttore – 3 anni <i>on-site</i>.</li> </ol>
2) <b>SOFTWARE</b>	<p>In generale tutto il <i>software</i> dedicato al processamento deve essere installabile in remoto su server mentre il <i>software</i> di acquisizione e controllo della qualità del dato prodotto deve essere installato anche in locale sulla <i>workstation</i>.</p> <p>Il <i>software</i> deve incorporare tutte le funzionalità per il pieno controllo operativo dello strumento, inclusa la calibrazione ed il controllo e gestione di un sistema cromatografico, incluso il supporto alla annotazione</p>





strutturale dei composti.

Il *software* deve permettere una determinazione quantitativa nonché deve essere in grado di integrare automaticamente i picchi e deconvolvere gli spettri, di cercare in librerie (con possibilità di creare proprie librerie) e di comparare i diversi campioni. Deve essere garantita la possibilità di processare campioni singoli o multipli durante l'acquisizione dei dati. Deve essere possibile salvare e modificare i metodi ed esportare i dati ai fini del deposito su repositories pubbliche (es. *MetaboLights*).

I calcoli per l'integrazione dei picchi, la calibrazione e la quantificazione devono essere completamente automatizzabili, facilmente visualizzabili dall'operatore, riprocessabili rapidamente al cambiamento dei parametri di calcolo.

Il *software* deve permettere la generazione di *report* visibili ed esportabili verso un sistema terzo. Il *report* deve essere salvato e processato indipendentemente dai dati originali.

È compresa la fornitura di eventuali aggiornamenti *software* e *firmware* che vengano rilasciati almeno fino al termine del periodo di garanzia della strumentazione – minimo 24 mesi.

## 6. Schema di contratto

Le prestazioni contrattuali richieste sono descritte nello schema di capitolato speciale d'appalto parte I – disciplina amministrativa e a cui si rinvia. Tale documento, per la parte amministrativa, è stato redatto con il supporto preliminare della Ripartizione Patrimonio, Contratti e Affari Generali così come il relativo schema di contratto (allegato 2).

\*\*\*

19 GIU. 2019

San Michele all'Adige, \_\_\_\_\_

IL REDATTORE DEL PROGETTO

  
- prof. Fulvio Mattivi -

\*\*\*

LA RESPONSABILE SCIENTIFICA DEL PROGETTO FRUITOMICS

  
- dott.ssa Urska Vrhovsek -

\*\*\*

LA DIRIGENTE DEL CENTRO RICERCA E INNOVAZIONE  
Responsabile del procedimento in fase di progettazione

  
- dott.ssa Annapaola Rizzoli -



