



CAHIER DES CLAUSES TECHNIQUES PARTICULIÈRES

MARCHÉ PUBLIC DE FOURNITURES COURANTES ET DE SERVICES

**Fourniture d'un spectromètre de masse
reconditionné pouvant réaliser des mesures de masse
en haute résolution.**

Université Grenoble Alpes
Institut de Chimie Moléculaire de Grenoble
Bâtiment Nanobio,
570 rue de la chimie
1er étage salle 131
38610 Gières

La Plateforme de Spectrométrie de Masse (PSM) de l'Institut de Chimie Moléculaire de Grenoble (ICMG) désire s'équiper d'un spectromètre qui doit pouvoir déterminer la masse de composés avec une haute résolution et une grande précision de masse, de façon à pouvoir séparer des molécules de faible différence de masse. Ce spectromètre sera également utilisé par une équipe de l'Institut de Planétologie et d'Astrophysique de Grenoble (IPAG) en remplacement d'un spectromètre LTQ Orbitrap XL obsolète. Ce nouveau spectromètre doit donc présenter une résolution supérieure au LTQ Orbitrap XL.

La PSM réalise des prestations de spectrométrie de masse pour des équipes de recherche aux thématiques pluridisciplinaires et doit donc pouvoir analyser des molécules de nature très variées. L'appareil doit être polyvalent pour satisfaire l'ensemble des besoins exprimés par les utilisateurs et comporter à minima une source d'ionisation electrospray (ESI). L'appareil doit pouvoir être utilisé en infusion direct (pousse seringue) et être couplé à un chromatographe en phase liquide ultra-haute performance (UHPLC) de modèle Ultimate 3000RS (pompe HPG3400RS) (Thermofisher scientifique) de façon à pouvoir réaliser des analyses LC-MS et LC-MS/MS. Les molécules analysées seraient de natures variées allant de petites molécules organiques, organométalliques à des macromolécules telles que des protéines. L'appareil doit donc être capable de déconvoluer des molécules multichargées avec des états de charges élevés. Cet appareil serait utilisé entre autres dans le cadre de mesures de vérifications de masse exacte, d'applications de types métabolomiques, d'analyses de contaminants...

Le spectromètre proposé par le fournisseur est un spectromètre reconditionné dont l'âge de la première mise en service ne peut excéder 10 ans. L'appareil doit pouvoir bénéficier d'une durée de disponibilité des pièces détachées de 7 ans minimum.

A. Sources

- Source ESI fonctionnant aussi bien en mode positif que négatif, débit 1 µl/min à 1 ml/min (plage minimum)
- Changement des sources facile, rapide et sans rupture du vide
- Les sources doivent être thermostatées avec température variable pouvant être réglée par l'opérateur au niveau du logiciel. L'opérateur doit pouvoir intervenir sur les paramètres de sources tels que flux d'azote, les différentes tensions (cône, skimmer, capillaire.), la température.

Prestations supplémentaires éventuelles

Le candidat doit formuler, dans le cadre de réponse (partie II du cadre de réponse), une proposition financière relative à chaque élément technique suivant :

- **Source APCI**
- **Source APPI**

B. Spectromètre

Le spectromètre doit assurer une mesure de masse stable dans le temps, à la résolution **minimale de 140 000 ou plus selon les performances de l'instrument, permettre l'analyse des ions positifs et négatifs**. Il doit pouvoir fonctionner en mode alternatif (commutation positif et négatif) sur une même injection. Doit avoir une vitesse de balayage compatible avec des runs UHPLC.

L'introduction des échantillons dans la source pourra se faire par infusion directe ou par l'intermédiaire de l'UHPLC Ultimate 3000RS (pompe HPG3400RS) (Thermofisher scientifique) couplée au spectromètre (couplage réalisé par le fournisseur).

Pour une question d'hygiène et de sécurité, la pompe primaire sera installée sur une plateforme située au-dessous du plancher de la salle où sera installé le spectromètre de masse. La distance entre la pompe primaire et le spectromètre doit donc être de 2.5 m sans altération de ses caractéristiques techniques. Le pompage primaire doit être suffisamment puissant pour supporter cette distance. **Pour**

l'installation il faut donc prévoir une longueur de tuyau suffisante et de même pour la connexion électrique. Dans le cas où cela ne serait pas possible un caisson antibruit devra être proposé.

Le spectromètre de masse doit pouvoir fonctionner selon les modes d'acquisitions suivants :

- Mode MS couplé ou non à l'UHPLC: spectre de masse complet à haute résolution
- Mode MS/MS à haute résolution couplé ou non à l'UHPLC-
- Mode SIM en couplage avec UHPLC : sélection d'un ion d'intérêt.

- Mode SRM, PRM

Spécifications :

- Gamme de masse : 50-6000 Daltons minimum.
- Résolution en full scan supérieur ou égal à 140000,
- Précision en masse <3ppm
- Capacité MS/MS automatique avec acquisition sur plusieurs ions parents, permettant le déclenchement automatique du mode MS/MS lorsqu'un composé d'intérêt est détecté, selon les critères définis par l'utilisateur.
- Commutation possible entre les modes de détection des ions positifs et négatifs dans un même run en LC-MS

C. Informatique et Logiciels

Ordinateur avec les caractéristiques suivantes :

- Une station informatique, ayant une configuration optimale pour le pilotage de l'ensemble des dispositifs et l'acquisition des données, sous Windows (Windows 11 de préférence). Le titulaire intégrera deux (2) licences minimum.

Logiciels :

- Logiciel de pilotage complet de l'appareil (Spectromètre et en couplage avec l'UHPLC). Possibilité de configurer le logiciel en mode expert pour un pilotage précis de l'appareil
- Logiciel d'acquisition sous environnement Windows qui permette une optimisation du signal avant l'acquisition ainsi que l'acquisition et le stockage automatique des données.
- Il est entendu que les logiciels seront fournis dans leur version la plus récente. Les conditions de mise à jour devront être précisées.
- Logiciel de déconvolution de charges pouvant traiter des spectres de tous types de composés allant du di-chargé à des protéines de haut poids moléculaire avec un état de charge au-delà de 15 et sans limitation, avec reconstruction du spectre. L'opérateur doit pouvoir agir sur les paramètres de déconvolution (ex cibler une gamme de masse, un état de charge, un niveau d'intensité des pics à déconvoluer, etc...)
- Logiciel de traitement des données avec des modules pour la quantification,
- Logiciel de calcul de formules brutes basé sur la MS et la MS/MS.
- La création de banques de données MS et MS/MS pour une même molécule
- Logiciel de prédiction de formule brute.

D. Possibilités d'évolution

- L'appareil doit permettre une évolution future vers un mode de fragmentation UVPD.
- L'appareil doit pouvoir être upgradé pour travailler dans le domaine des hautes masses (études de protéines en condition native).