



Financé par
l'Union européenne



MARCHE PUBLIC DE FOURNITURES ET DE SERVICES

Université de Haute-Alsace
2, rue des Frères Lumière
68093 Mulhouse Cedex

Tél. 03 89 33 66 14 – mail : marches@uha.fr

ACQUISITION D'UN ENSEMBLE DE CHROMATOGRAPHIE EN PHASE GAZEUSE - SPECTROMÉTRIE DE MASSE

CAHIER DES CLAUSES TECHNIQUES PARTICULIÈRES

Cahier des Charges pour la fourniture d'un ensemble chromatographie en phase gazeuse - spectrométrie de masse (GC-MS)

Entité acheteuse	Université de Haute-Alsace (UHA)
Bénéficiaires de l'achat	Laboratoire d'Innovation Moléculaire et Applications (LIMA) UMR CNRS 7042 3bis, rue Alfred Werner 68093 MULHOUSE Cedex Laboratoire Vigne, Biotechnologies et Environnement (LVBE) UR 3991 33, rue de Herrlisheim 68008 COLMAR Cedex
Contacts techniques	LIMA Mme Cécile JOYEUX Tél. : 03.89.33.68.72 - courriel : cecile.joyeux@uha.fr LVBE Mme Mary-Lorène GODDARD Tél. : 03.89.33.67.69 - courriel : mary-lorene.goddard@uha.fr
Contact administratif	Service Achats et Marchés Publics 2, rue des Frères Lumière 68093 MULHOUSE Cedex M. Arnaud HUMBERT Tél. : 03.89.33.66.14 - courriel : marches@uha.fr

Sommaire

1. **Objet du marché/Contexte**
2. **Caractéristiques principales**
 - 2.1 Chromatographe en phase gazeuse
 - 2.2 Passeur multifonctions
 - 2.3 Couplage avec un spectromètre de masse
 - 2.4 Logiciel(s) de pilotage, d'acquisition et de traitement des données
 - 2.5 Tests sur échantillons
 - 2.6 Prestations ou consommables additionnels
3. **Livraison**
4. **Installation, mise en service et formation**
5. **Garantie**
6. **Service après-vente et assistance technique**
7. **Equipements et prestations additionnelles souhaités par l'UHA**
8. **Variantes à l'initiative des candidats**

1. Objet du marché/ Contexte

Le marché porte sur la fourniture d'un ensemble de chromatographie en phase gazeuse couplée à un spectromètre de masse (GC-MS).

Ce système GC-MS viendra remplacer un système GCMS-QP2010 de Shimadzu acquis en 2007 et permettra donc d'acquérir un ensemble plus récent et surtout beaucoup plus performant quant à la séparation chromatographique et la détection de masse (gain en résolution, sensibilité et précision). Il nous permettra également d'acquérir un passeur automatique multifonctions, nous permettant de développer et diversifier plus tard la gamme des analyses réalisables pour les chercheurs des laboratoires bénéficiaires.

Les laboratoires LIMA et LVBE utiliseront ce système GC-MS dans le cadre de différentes applications :

- Réalisation d'analyses métabolomiques sur du matériel biologique en mode non ciblé avec un couplage chromatographie-spectrométrie de masse
- Réalisation d'analyses ciblées quantitatives (mode SIM)
- Analyses sur des mélanges qui peuvent être très complexes (centaines à milliers de molécules en concentrations différentes) et de diverses polarités :
 - Molécules polaires telles que des sucres, acides aminés et petits acides organiques (cela suppose une dérivation chimique au préalable à l'aide d'un passeur multifonctions).
 - Molécules moyennement polaires telles que des lipides et composés aromatiques (flavonoïdes et stilbènes notamment)
 - Huiles essentielles ou mélange de composés pas ou peu polaires.

Ce nouveau système devra également permettre l'analyse de volatils, notamment à l'aide d'un système de thermodésorption ainsi que de l'utilisation de fibres et/ou barreaux adsorbants (SPME fibers, SPME arrows et /ou SBSE).

Ce document présente les caractéristiques techniques que devra avoir le système GC-MS de base, incluant un passeur multifonctions.

Le matériel proposé sera neuf mais le candidat pourra proposer en variante du matériel de démonstration.

Le système proposé devra être suffisamment résolutif et sensible, avec une bonne gamme dynamique. Le logiciel d'analyses des données devra permettre la quantification des molécules ainsi que l'identification de structures via des bibliothèques spectrales, et les algorithmes de déconvolution devront être puissants.

2. Caractéristiques techniques – Prestations attendues

L'ensemble GC-MS avec passeur multifonctions qui sera acquis par ce marché sera positionné dans une salle de laboratoire équipée des branchements électriques nécessaires, d'un système de délivrance de gaz hélium à pression contrôlée, et si nécessaire d'une paillasse adaptée aux dimensions et poids de l'appareillage complet.

Nous attirons votre attention sur le fait que, dans cette salle, un poids limite de 350kg/m² est supportable par les dalles de plancher et la hauteur maximale utile sous plafond se situe à 3m. Les appareils proposés devront répondre avant tout à ces 2 contraintes.

2.1 chromatographe en phase gazeuse

La configuration demandée est un appareil GC, équipé d'un passeur d'échantillons (détails au paragraphe suivant), d'un injecteur, d'un four et d'une ligne de transfert vers un détecteur MS, permettant de travailler avec le gaz hélium. Les températures maximales de l'injecteur, du four et de ligne de transfert devront être supérieure à 300°C.

Le fournisseur devra mentionner les caractéristiques techniques de chacun des éléments (température maximale de travail, pression de gaz demandée en entrée du GC, etc) constitutifs du système GC :

- La compatibilité du système avec des gaz vecteurs autre que l'hélium devra être précisée. D'autre part, le mode de contrôle du gaz vecteur devra pouvoir se faire selon au moins 2 choix parmi les modes suivants : pression constante, débit constant et/ou vitesse constante.
- Les fonctions du passeur d'échantillons sont détaillées dans le paragraphe suivant. Les possibilités d'échantillonnage fournies devront être compatible avec le ou les injecteurs fournis.
- L'injecteur devra permettre l'introduction de volumes d'échantillons liquides (mode split/splitless ou PTV).
- Au moins l'un des modes d'introduction de supports adsorbants suivant est demandée : SPME fibres ou arrows, barreaux (SBSE) (voir §2.2 Passeur). Les candidats devront fournir l'injecteur correspondant ainsi qu'au minimum un lot de consommables (inserts et supports avec différentes phases adsorbantes) permettant de réaliser les diverses injections possibles.
- De même, la possibilité d'injecter via la technique de thermo-désorption (TD) devra être intégrée à la solution proposée (injecteur spécifique, voir §2.2 Passeur). Il est attendu un « piège froid » piégeant les composés à -35°C et une température de thermodésorption du piège pouvant monter à minimum 300°C. Une solution sans utilisation de CO₂ ou d'azote liquide serait un plus.
- Un four colonne permettant un chauffage jusqu'à au moins 350°C. Les candidats préciseront la plage de température, la vitesse de rampe maximale possible et la capacité du four à réaliser des gradients thermiques précis. Les dimensions des supports de colonnes, compatibles avec les dimensions du four, devront être précisées.
- Une ligne de transfert thermostatée (température maximale possible à préciser).

Autres caractéristiques attendues

- La fourniture d'un kit d'évaluation de la performance du système est un plus.
- Un système de contrôle du gaz porteur et de gestion des maintenances devra être intégré au logiciel de contrôle du système, mettant visuellement en évidence les points importants du système à l'écran. La présence d'alarmes sonores serait un plus.

Dans le cas où plusieurs injecteurs sont fournis, les candidats devront préciser si plusieurs colonnes peuvent être positionnées dès le départ dans le four. Sinon, dans le cas où il serait nécessaire de repositionner la colonne sur l'injecteur à chaque changement d'injecteur, il est attendu la fourniture d'une solution pratique permettant le changement côté MS sans casse du vide. Les caractéristiques et le mode de fonctionnement du système devra être décrit dans la réponse.

Les candidats pourront apporter les précisions et les descriptions supplémentaires qu'ils jugent utiles tels que les résultats en termes de stabilité en temps de rétention, reproductibilité, carry-over, résolution, sensibilité ...

2.2 Passeur multifonctions

Le passeur multifonctions sera utilisé principalement pour réaliser la dérivation chimique pré-injection. Il est attendu qu'une fois la réaction faite, l'échantillon soit analysé automatiquement et que la réaction de dérivation sur l'échantillon suivant démarre pendant l'analyse du précédent.

Le logiciel devra donc permettre la création de séquences multi-étapes et la gestion du temps entre les durées de dérivation et les temps d'injections, afin de perdre le moins de temps possible entre la fin du processus de dérivation et l'injection. Une automatisation du processus de dérivation est attendue notamment sur ces 3 points : ajout automatique des réactifs avec un timing programmé, mélange par vortex ou agitation douce, incubation à chaque étape de dérivation avec contrôle de la température, de l'agitation et du temps de réaction.

Les spécificités minimales du passeur qui sont attendues sont celles permettant l'introduction d'échantillons liquides ainsi que l'analyse de tubes, fibres et/ou barreaux adsorbants par désorption.

Attention : certaines parties du système (modules du passeur) comme les seringues ou les septa devront être compatibles avec les réactifs utilisés (comme de la méthoxyamine dans la pyridine ou du MSTFA).

Modules souhaités :

- Capacités du passeur / Zone de stockage des piluliers :
 - Le positionnement de plusieurs dimensions de piluliers (piluliers de 2mL, bouteilles de 10mL...). Le nombre et les volumes de ces piluliers sont à préciser.
La possibilité de refroidir les échantillons liquides à l'aide d'un module serait un plus (cf partie accord-cadre).
 - Le prélèvement d'un volume de liquide (inférieur à 10µL) pour l'injecter.
 - Une sélection de seringues adaptées à l'/aux injecteur(s) utilisé et aux types de réactifs à prélever.
 - 3 seringues devront être fournies au minimum avec le système : une pour l'introduction dans l'injecteur (10µL), les 2 autres pour les réactifs à utiliser lors de la dérivation (25µL, 100µL par exemple).
 - Le nombre de supports-seringues devra être au minimum de 2 (mieux si 3 ou avec une station pour poser les seringues) pour permettre l'introduction de 2 réactifs dérivatisants à des volumes différents. Attention : suivant les dérivatisations, il est possible que des volumes plus importants de réactifs soient nécessaires.
 - Le rinçage de la seringue d'injection (10µL) devra être réalisé à l'aide d'un module de rinçage contenant à minima 3 positions : 1 pour la poubelle et 2 pour des solvants de polarité différentes.
 - Les volumes qui seront utilisés (solvants) et générés (déchet) pour les rinçages lors des dérivatisations au cours d'une séquence risquent d'être importants. Il sera donc souhaitable d'avoir un module spécifique permettant une réserve de solvants et une poubelle de volumes plus importants que celui utilisé pour le rinçage de la seringue d'injection.
- Gestion des Réactifs et Dérivation Automatisée :
 - Attention au moins 2 réactifs différents devront pouvoir être utilisés.
 - Possibilité de diluer un échantillon (ajout de volume défini de solvant(s), agitation).
 - Module d'agitation d'un échantillon (mélange par vortex).

- 2 Modules de chauffe contrôlée d'un échantillon avec agitation douce (accélération de réaction, pratique quand 2 réactions successives ne se font pas à la même température).
- Un module de type thermodésorption est attendu. Afin d'obtenir une analyse correcte de nos composés les plus volatils, il est attendu un refroidissement du piège froid de l'injecteur à au moins -35°C. Le but serait de pouvoir analyser des COV ou COsV piégés dans un tube, un insert (métallique ou verre). Pour cela, différents modules peuvent nous être proposés afin d'augmenter la capacité et/ou la vitesse d'analyse du passeur multifonctions fourni dans le présent marché :
 - Injecteur spécifique pour thermodésorber des tubes ou carrément un thermo-désorbeur externe.
 - Une solution sans utilisation de CO₂ ou d'azote liquide serait un plus.
 - Une automatisation de l'introduction des tubes dans le process de thermo-désorption serait un plus (l'indiquer dans les prestations à bons de commande ultérieurs si pas fourni de base).
 - La capacité à reconditionner un tube TD avec l'appareil serait un plus (à l'aide d'un module supplémentaire de reconditionnement par exemple).
- Un module permettant d'analyser des supports adsorbants (SPME fibers, SPME arrows et /ou barreaux SBSE) est également demandé. Merci de coordonner les types d'introductions fournies entre l'injecteur et le passeur. La possibilité de mise en œuvre d'un support de type barreau nous semble intéressant pour un grand nombre de raisons : mise en œuvre simple, bon marché, recyclable, utilisable aussi bien avec des liquides que des gaz, grand volume de composés piégeables...
La gestion automatisée de ce type d'introduction ainsi que la capacité à reconditionner les supports adsorbants seraient un plus.

Compatibilité :

Le passeur doit être

- soit entièrement géré par le même logiciel que le GC-MS,
- soit la compatibilité des logiciels de pilotage des deux instruments doit être assurée.

Il faut s'assurer également de la compatibilité des protocoles de communication afin d'avoir un workflow fluide.

Le mode d'injection devra être polyvalent en fonction de l'injecteur sélectionné lors de la programmation de méthode. Les candidats devront préciser les volumes d'injection programmables en fonction de l'injecteur utilisé.

2.3 Couplage avec un spectromètre de masse

La demande concerne l'acquisition d'un système permettant, en sortie de colonne via une ligne de transfert, l'ionisation à l'aide d'une source à impact électronique. L'énergie d'ionisation devra être modulable et sa valeur contrôlable à l'aide du logiciel. L'appareil devra permettre de travailler en mode Scan et Sim, ainsi que, si possible, en modes Scan et Sim simultanés.

Les candidats expliciteront les caractéristiques suivantes de leur appareil :

- Précision de mesure
- Précision isotopique
- Gamme de masse m/z
- Gamme dynamique
- Résolution : préciser les valeurs aux basses (env. 200) et hautes (2500) masses
- Vitesses d'acquisition
- Valeur de signal sur bruit

- Limites de détection dans les 2 modes (scan et sim)

L'analyseur devra permettre une acquisition dans différents modes, notamment les modes Full scan, Sim, avec une possibilité de fonctionnement par « fenêtres ». La possibilité d'obtenir des informations permettant d'avoir en « simultané » les 2 types de données (non ciblée et ciblée) sans perte d'information sera un plus.

Le spectromètre de masse devra être fourni avec les éléments listés ci-dessous (merci de préciser également leurs caractéristiques respectives) :

- Concernant la source EI demandée, la plage de température d'utilisation devra être précisée ainsi que la gamme d'énergie d'ionisation possible. Une maintenance aisée de la source est demandée. Il devra figurer dans la proposition le nombre de pièces démontables et nettoyables qui constituent la source d'ions.
L'ajout d'une 2^e source permettant de faire un changement rapide lors de maintenance de source sera un plus. D'autre part, la fourniture de source permettant un encrassement moindre et une durée allongée entre les maintenances est souhaitée.
Les candidats indiqueront le nombre de filaments positionnés au niveau de la source (généralement 1 ou 2). Dans le cas où la source est équipée d'un seul filament, 1 second de rechange doit être immédiatement fourni. De même, une longue durée de vie de filament est souhaitable (merci d'indiquer la durée de vie moyenne du filament fourni).
- En termes de réglage de la détection, la possibilité de réaliser une calibration (autotune, tune, calibration) de l'analyseur devra être intégrée au système. La stabilité du réglage et la fréquence d'exécution devront être précisées.
- Concernant la maintenance interne du spectromètre de masse, suivant l'analyseur proposé, merci de préciser les différentes parties susceptibles de pouvoir être encrassées. Hormis un accès aisé à la source, une facilité d'accès à ces divers éléments positionnés après la source et susceptibles de s'encrasser (lentilles) sera un plus.
- Un kit de maintenance pour la source EI devra être fourni.
- Concernant le système de pompage, les candidats indiqueront les caractéristiques de la pompe primaire et de la pompe permettant le vide secondaire (pompe turbo-moléculaire ou autre) en mentionnant :
 - o la marque et le modèle de pompe,
 - o les débits de pompage,
 - o les valeurs de vides primaire et secondaire maximum atteignables et ceux préconisés lors de l'utilisation du MS,
 - o le nombre d'étages éventuels (si pompe turbomoléculaire multi-étage),
 - o la liste des consommables liés à la maintenance annuelle de la pompe primaire,
 - o le type de maintenance nécessaire pour le vide secondaire (si nécessaire) ainsi que la fréquence de cette maintenance.
- Concernant le détecteur, merci d'indiquer le type de détecteur fourni avec l'appareil ainsi que ses caractéristiques en termes de signal sur bruit et de limite de détection, ainsi que sa durée de vie estimée.

Autres caractéristiques attendues

- La présence d'alarmes si l'état du spectromètre de masse sort des spécifications requises (arrivée de gaz en source, température...).
- Un kit d'évaluation de la performance du système.

Les candidats pourront apporter les précisions et les descriptions supplémentaires qu'ils jugent utiles.

2.4 Logiciel(s) de pilotage, d'acquisition et de traitement des données

L'ensemble GC-MS sera fourni avec un logiciel ou une suite logicielle incluant :

- Le pilotage du système complet (chromatographe et spectromètre de masse) dont la mesure et le contrôle du vide primaire et secondaire,
- L'acquisition et le traitement des données (analyses quantitatives et qualitatives dont l'identification de composés). Nous détaillerons cette partie à la suite.

Le système informatique PC (ordinateur, écran, clavier, souris) devra être proposé dans l'offre.

Le candidat est invité à inclure un 2^e disque dur permettant l'enregistrement et le stockage des données (merci de prévoir une capacité cohérente avec les dimensions des fichiers enregistrés).

Le système devra être sous Windows 11 afin que nous puissions garantir la sécurité informatique de l'ordinateur au sein de notre réseau. La suite logicielle fournie devra également être compatible avec ce système d'exploitation.

La possibilité de pouvoir traiter les données à partir d'autres postes informatiques serait fortement appréciée (3 licences minimum pour le traitement des données en plus de celle présente sur le poste d'acquisition). L'alternative souhaitée est la fourniture de plusieurs licences flottantes du logiciel de traitement (5 licences flottantes), en plus de la licence au poste d'acquisition.

Le fournisseur détaillera également le moyen de communication entre le système et l'ordinateur de pilotage.

a. Logiciel(s) ou module(s) d'acquisition et de traitement des données

La suite logicielle ou le logiciel utilisé pour contrôler le GC-MS doit offrir les éléments suivants :

- Une partie consacrée au diagnostic et à la maintenance du système. La visualisation de la configuration et du bon fonctionnement en temps réel du système est indispensable (présence d'un « logbook » affichant les erreurs et pannes) ainsi que la présence d'alarmes si l'état du chromatographe et du spectromètre sort des spécifications requises.
- Automatisation et séquençement : Gestion de batchs d'échantillons, avec intégration des blancs, des QC (Quality Controls) et des standards internes.
- Modes d'acquisition adaptés :
 - o SCAN : Acquisition large pour l'identification des composés inconnus.
 - o SIM (Single Ion Monitoring) : Amélioration de la sensibilité pour les composés connus.
- Synchronisation avec des bases de données pour une pré-identification rapide des analytes.
- Capacité de compensation des dérives : correction automatique des variations d'instrument (ex. dérive du temps de rétention, normalisation des signaux).
- Différents formats de données : possibilité de sauvegarder dans les formats .mzML, .mzXML, .NetCDF pour les données spectrales ainsi que csv ou xlsx pour les tables de données qualitatives ou quantitatives.

b. Logiciel(s) de traitement des données

Le(s) logiciel(s) de traitement des données devra (devront) permettre l'analyse qualitative et quantitative. Les éléments constitutifs des logiciels les plus importants sont listés ci-dessous :

- Extraction des pics chromatographiques : détection automatique des pics dans le chromatogramme total ionique (TIC), algorithme de déconvolution des signaux puissants pour séparer au mieux des composés co-éluants, ajustement manuel possible pour améliorer la précision, détection des pics anormaux (pics satellites, effets de queue).
- Intégration des pics : différentes méthodes d'intégration automatique et intégration manuelle, correction de ligne de base, différentes méthodes de lissage des signaux, gestion des pics asymétriques et épaulements.
- Alignement des temps de rétention : alignement automatique des pics d'un échantillon à l'autre, correction des décalages dus aux variations instrumentales.
- En vue d'analyses métabolomiques, un outil de récursion automatique pour la détection des pics chromatographiques serait un plus.
- Filtrage et correction du bruit de fond.
- Normalisation : normalisation par rapport à des standards internes, volumes injectés, masses prélevées.
- Quantification absolue : méthodes d'étalonnage courantes (courbe de calibration externe, méthodes des ajouts dosés...), ajustement des modèles (linéaire, quadratique, logarithmique), calcul des limites de détection (LOD) et limites de quantification (LOQ).
- Visualisation interactive des résultats : tableaux interactifs avec tri et filtres, graphiques dynamiques.
- Automatisation des traitements en batch.
- Résultats : génération automatisée de rapports PDF et de tables Excel, csv.

Concernant l'identification des molécules, nous souhaitons une comparaison possible avec des bibliothèques spectrales avec une recherche simultanée basée sur la similarité et prenant en compte les indices de rétention (mélange d'alcane ou de FAMES). Des bibliothèques telles que celle vendue par NIST pourront être incluses dans l'offre.

Nous souhaitons également pouvoir utiliser nos bibliothèques personnelles déjà élaborées et utiliser les futures bibliothèques générées dans d'autres logiciels (compatibilité de format). **Nous attendons des candidats la conversion des bases de données déjà créées au laboratoire par les utilisateurs dans le cadre de leurs recherches depuis le format existant (.lib) vers le format reconnu par leur logiciel.**

Le format initial de ces bases de données spectrales est un ensemble de fichiers dont un fichier .LIB (propriété Shimadzu). Il est possible de convertir ce format en fichier texte (*.txt) ou en format JCAMP (*.jdx) via le logiciel d'origine, puis une conversion en format .msp est ensuite possible via d'autres logiciels. D'autre part, ce serait un plus que le logiciel fourni lise les bibliothèques en format .msp car plusieurs bibliothèques spectrales utilisées dans le cadre de projets de recherche nous sont accessibles sous ce format (MassBank, RIKEN, GNPS, Fiehn et autres). Sinon, il serait souhaitable que la conversion du format .msp vers le format du logiciel fourni soit facilitée.

2.5 Tests sur échantillons

Afin de pouvoir juger des caractéristiques techniques attendues pour le système GC-MS proposé (caractéristiques liées à l'appareillage ainsi que les possibilités techniques des logiciels ou modules), les laboratoires LIMA et LVBE souhaitent que des tests sur des échantillons, fournis et envoyés aux candidats, soient réalisés.

Il y a deux types d'échantillons et donc deux types d'analyse en fonction des applications des laboratoires. Pour chaque analyse demandée, les informations nécessaires sur les échantillons sont indiquées ci-après. Une description de l'évaluation souhaitée est également explicitée ci-dessous.

2.5.1 Analyse de métabolites hydrosolubles de la vigne après dérivation MeOx-MSTFA

a. Informations sur les échantillons

Le laboratoire LIMA fournira 8 échantillons :

- 1 échantillon de **glucose** (quelques mg)
- 1 échantillon de **galactose** (quelques mg)
- 6 échantillons d'extraits lyophilisés issus de l'extraction de racine de vigne par un tampon phosphate en triplicat biologique selon 2 modalités :
 - Etat initial : **LIMA_BOT_R_NI_1,**
LIMA_BOT_R_NI_12
et LIMA_BOT_R_NI_3
 - 14 semaines après une inoculation artificielle d'un champignon :
LIMA_BOT_R_Bt14_1,
LIMA_BOT_R_Bt14_2
et LIMA_BOT_R_Bt14_3

Les extraits lyophilisés sont fournis dans des vials bruns directement utilisable pour les analyses. Ils peuvent être conservés à température ambiante ou à 4°C.

b. Evaluation souhaitée

1/ Réaliser une quantification du glucose et du galactose au sein d'une matrice complexe (extraits de racines de vigne).

Résultats attendus à minima:

- *les valeurs de LOD et LOQ obtenues*
- *les teneurs en glucose et en galactose dans les 6 extraits fournis*

2/ Réaliser une analyse métabolomique non ciblée comprenant :

- a- Détection des features
- b- Déconvolution spectrale
- c- Intégration des features
- d- Identification des features (les bases de données spectrales utilisées seront précisées)

Résultats attendus : fichier d'export des résultats (format .xlsx ou .csv) contenant pour chaque échantillon la liste des features détectés avec les informations suivantes : ion quantifiant, temps de rétention, indice de rétention (RI), aire de pic et annotation).

Nous apprécierons particulièrement que les candidats mettent en évidence les capacités de leur suite logicielle en matière de détection des co-élutions et de proposition d'annotations.

Dans la mesure des possibilités logicielles des candidats, un alignement des pics entre échantillons permettant la génération d'une table récapitulative sera un plus.

Nous laissons également la liberté aux candidats de faire une analyse statistique des résultats afin de mettre en lumière des métabolites discriminants.

Document annexe d'informations :

Le document annexe regroupe les informations suivantes :

- Le protocole de préparation des échantillons des extraits fournis
- Le protocole de dérivation utilisé par le laboratoire
- Le protocole d'analyse GC-MS utilisé par le laboratoire
- Des informations utiles sur les composés à étudier (glucose et galactose)

2.5.2 Analyse par SPME ou SBSE de produits formulés provenant d'huiles essentielles

2 échantillons pour analyse via SPME ou SBSE (technique et matrice d'adsorption utilisées à préciser par le candidat) : IH et AH. Ce sont 2 produits formulés comprenant un mélange d'env. 10 composés type huile essentielle dans l'eau avec des adjuvants permettant la solubilisation des composés dans l'eau : soit du dipropylenglycol (DPG) et/ou de la triacétine, soit un hydrosolubilisant/émulsifiant (LRI = PPG-26 Buteth-26 / PEG-40 hydrogenated castor oil), soit avec de l'EDTA, du TWEEN 20, EDG et de l'acide citrique.

Les composés attendus pour la détection sont parmi les suivants :

Pour le IH : Limonene, beta-linalool, alpha-terpineol, linalyl acetate, geraniol, alpha-citral, neryl acetate, eugenol, geranyl acetate, methyl dihydrojasmonates (Z et E), 2-hexyl-cinnamaldehydes (Z et E) avec le DPG et la triacétine.

Pour le AH : Heptanal, benzaldéhyde, octanal, vertocitrals C (cis et trans), benzyl acetate, gardenol, anisaldehyde, 2-hexyl-cinnamaldehydes (Z et E), avec de la triacétine et / ou du DPG.

Au laboratoire, ces échantillons ont été extraits par ELL au dichlorométhane. Les analyses de ces extraits organiques ont ensuite été réalisées sur une colonne SGE BPX-5 de dimensions 0.15mmx 25m et d'épaisseur de film 0.25µm. La température de l'injecteur était fixée à 230°C. Le gaz vecteur étant en mode vitesse constante (25cm/s), la température du four était d'abord maintenue à 70°C pendant 3min. puis augmentait à 3.5°C/min. jusqu'à 160°C puis à 7°C/min. jusqu'à 260°C. La température finale était maintenue pendant 4.6min. pour obtenir un temps d'analyse de 45min. Cette méthode devra certainement être adaptée à la colonne utilisée et à l'injection par SPME ou SBSE.

Les résultats sont attendus sous forme de tables de composés détectés et identifiés avec leurs pourcentages d'aires.

3. Livraison, installation et mise en service

Le fournisseur assurera sous son entière responsabilité et à ses frais, le transport, l'installation et la mise en service de l'ensemble du matériel sur le site. Les coûts de douane, d'expédition, de transport, d'assurance de transport et les taxes seront à la charge du fournisseur.

Le délai maximal de livraison attendu est de **10 semaines** à compter de la date de notification du marché.

Le matériel sera livré à l'adresse suivante entre 9h et 12h ou entre 14h et 17h :

LIMA UMR 7042
Mme Cécile JOYEUX
IRJBD, RdC, Aile A
3bis rue Alfred Werner
68093 Mulhouse Cedex

L'installation ne pourra avoir lieu que lorsque le chromatographe, le spectromètre et tous les accessoires auront été livrés (dont la pompe primaire et l'ordinateur inclus dans l'offre). Le fournisseur sera également responsable de l'installation de ces accessoires.

L'installation et la mise en service seront effectuées par le titulaire du marché, sous sa responsabilité et au lieu d'implantation indiqué, dans les 2 à 4 semaines suivant la livraison (hors fermeture UHA et selon dates à convenir avec l'UHA). Des tests de conformité et de performance du système GC-MS seront réalisés au cours de la mise en service.

L'offre comprendra également 2 périodes de formations décrites dans le paragraphe ci-dessous : la 1^e initiale dispensée en même temps que l'installation et l'autre plus poussée dans les 2 à 6 mois après le début de l'utilisation.

Une documentation technique et d'utilisation des logiciels (sous format papier ou fichiers informatiques) sera incluse et de préférence en langue française.

La conversion des bases de données non commerciales du laboratoire devra être fournie à la mise en service. Une vérification des données sera alors effectuée par le demandeur et en cas d'erreurs, un correctif sera attendu dans les meilleurs délais (maximum en même temps que la 2^e formation).

4. Formations

La formation initiale des utilisateurs sera effectuée par le titulaire du marché, sous sa responsabilité et au lieu d'implantation indiqué et au moment de l'installation.

Nous souhaitons que cette formation initiale (minimum 4 personnes) intègre :

- Une description de l'appareillage et une formation aux opérations de maintenance régulière.
- Une formation sur l'évaluation des performances et de l'état du système
- Une formation au logiciel de pilotage du système, d'acquisition et de traitement des données.

Une 2^e session de formation (dite de perfectionnement) sur site après 2 à 6 mois d'utilisation du système est également demandée pour au moins 4 personnes. La période de formation sera décidée par accord entre les parties, en fonction de l'avancée de la prise en main par les utilisateurs.

5. Garantie

Une garantie minimum de 2 ans, pièces, main d'œuvre et déplacements inclus, qui prend effet à la date de validation des tests de réception, est demandée sur l'ensemble du matériel fourni.

Une garantie de 1 an supplémentaire sera un plus.

Les conditions de garantie sont définies dans le CCAP.

6. Service après-vente et assistance technique

Le candidat détaillera le support analytique et le service après-vente associé à l'achat du système chromatographe-spectromètre de masse. Cette assistance devra être assurée par du personnel francophone et pourra s'opérer sous diverses formes : téléphone, contrôle à distance du système, email (à préciser).

Il est demandé au candidat de proposer un SAV réactif, disponible et joignable rapidement (aux heures ouvrées). Le délai moyen garanti de prise en charge (assistance à distance, intervention sur site) sera précisé. En cas d'immobilisation de tout ou partie du système GC-MS causant une rupture du service, la politique de prêt d'un système correspondant sera précisée (ou autre formulation identique).

Le candidat proposera différentes formules pour un contrat de maintenance qui démarrera à l'issue de la période de garantie pour 1 an, 3 ans ou 5 ans et dont les échéances seront annualisées.

Le candidat détaillera les prestations incluses et la liste des consommables inclus dans les contrats proposés. Devra également être détaillé le coût actuel d'une intervention curative dans nos locaux (frais de dossier, frais de déplacement, taux horaires personnel, frais de séjour...). Si ce coût diffère selon que le système est sous ou hors contrat de maintenance, les deux tarifs seront donnés.

Nous souhaitons également que les candidats fournissent à titre d'information la liste de toutes les pièces de maintenance de l'ensemble (GC-MS) avec leurs prix hors contrat de maintenance et leurs durées de vie moyenne (seringue, liner, SPME Fibers, SPME Arrows, SBSE barreaux, filament, pompe primaire, pompe turbomoléculaire, détecteur...). Si certaines pièces ne sont pas disponibles hors-contrat de maintenance, merci de préciser quel contrat lui est associé.

Le constructeur détaillera sa politique de fourniture des pièces détachées et notamment au-delà des 10 années suivant la vente du dernier modèle du GC-MS fourni dans le cadre de cette procédure d'achat, en particulier lorsque celles-ci ne sont plus disponibles en stock.

7. Partie en accord-cadre à bons de commande (achats dès la notification ou ultérieurs)

Les équipements et prestations de cette partie pourront être inclus dans l'enveloppe allouée à l'opération (266.5k€), ou alors proposés pour des achats ultérieurs par bons de commande sur la durée de l'accord-cadre.

Ils peuvent être, par ordre de priorité :

- Tout module permettant une gestion automatisée de l'introduction d'insert (SPME, SBSE, TD...).
- Un module de reconditionnement des tubes TD.
- Un module de reconditionnement des supports adsorbants (SPME fibres ou arrows, barreaux, selon fourniture), s'il existe.
- Un module d'injection en mode Dynamic Headspace avec ses consommables
- Un module permettant le refroidissement des échantillons liquides (pelletier).
- Un module de filtration automatisé.
- Une extension de garantie supplémentaire (préciser le nombre d'années).
- Un contrat de maintenance annuelle à débiter après la période de garantie
- Un contrat de maintenance sur 3 ans à débiter après la période de garantie
- Un contrat de maintenance sur 5 ans à débiter après la période de garantie
- Des lots de petits consommables compatibles avec le système : seringues, inserts SSL, Inserts TD, barreaux SBSE, SPME fibers, SPME arrows, etc.
- Une colonne de phase équivalente à la DB-5MS ou la BPX-5 en 0.15mm x 60m et d'épaisseur de film 0.25µm.
- Une colonne de phase équivalente à la DB-1MS en 0.15mm x 30m et d'épaisseur de film 0.25µm.
- Une colonne SGE de phase BP-X5 en 0.15mm x 25m et d'épaisseur de film 0.25µm.

Préciser pour chaque équipement, si l'ajout ultérieur est compatible avec l'offre de base (compatibilité avec le système et avec le logiciel) et s'il s'installe sans ou avec intervention de la part d'un technicien.

La liste n'est pas exhaustive. Les candidats pourront proposer tout module ou équipement permettant de renforcer la diversité des échantillons analysables par le système ainsi que l'automatisation de leurs injections.

8. Variantes à l'initiative des candidats

Les fournisseurs peuvent proposer des offres alternatives si celles-ci apportent une amélioration technique significative au système de base demandé par un complément d'accessoires ou d'équipement supplémentaire.

La variante proposée devra comprendre au minimum les spécificités techniques demandées dans l'offre de base. Le LIMA et le LVBE sont ouverts à des variantes proposant du matériel de démonstration dans la mesure où le matériel de démonstration respecte les spécificités techniques demandées dans l'offre de base. Le candidat devra indiquer l'année de fabrication de l'appareil, son utilisation passée (démonstration, client, ...), durée de vie prévue, disponibilité des pièces détachées de rechange.

La variante proposée devra respecter l'enveloppe budgétaire allouée à l'opération (cf CCAP et/ou règlement de la consultation).

Nombre maximum de variantes par candidat : trois (3).