

Pliego de especificaciones técnicas. Cromatógrafo de gases.

1- Descripción del equipo

CROMATÓGRAFO DE GASES ACOPLADO A ESPECTRÓMETRO DE MASAS TIPO TRAMPA DE IONES. SISTEMA AUTOMÁTICO HRGC/MS/MS

Que debe constar de:

- Cromatógrafo de gases equipado con inyector split/splitless para columnas capilares con control electrónico de la presión.
- Fuente iónica de alta eficacia con volúmenes iónicos intercambiables y filamentos de inserción directa para ionización electrónica (EI) y opcionalmente ionización química (CI) con ambos modos de trabajo en ionización positiva y negativa (PCI y ECD-MS); instalada en una posición externa del cuadrupolo de trampa iónica. Los iones generados en la fuente, serán acelerados a través de un sistema de lentes pulsado en el sistema de Trampa Iónica.
- Sistema de trabajo que permita monitorizar las masas o rangos de masas seleccionados individualmente de barrido a barrido. Detector de conversión dinódica de +/- 15kV y multiplicador de fácil acoplamiento a una electrónica sin ruido de fondo para la detección de iones negativos y positivos.

2- Características técnicas

Cromatógrafo de gases, que debe constar de:

- Inyector split-splitless con perfil térmico optimizado para ambos modos de inyección. Rango de temperatura entre 50 y 450 °C en incrementos de 1°C.
- Debe eliminar la discriminación para los compuestos pesados y asegurar una amplia linealidad con la inyección de grandes volúmenes.
- Control electrónico del gas portador, independiente mediante un controlador de flujo másico y presión que ajuste la presión de la columna y el flujo másico mas apropiados para cualquier aplicación. El rango de trabajo debe ser desde 0 hasta 250 Kpa (36 psi).
- 3 rampas de presión/flujo.
- El sistema debe permitir: ahorro del gas portador, calibración automática de la columna con medidas precisas de los parámetros de la columna y memorización de los mismos, test automático de fugas, compensación para variaciones de la temperatura y de la presión ambiente.
- La regulación del flujo debe ser posible en diferentes escalas, desde 0,1 a 100 ml/min con incrementos de 0,1 ml/min.
- Horno ultraestable de gran capacidad: Rango de temperatura entre pocos grados por encima de la temperatura ambiente hasta 450°C.
 - 7 rampas de temperatura entre 0,1 y 120°C/min.
 - Velocidad de enfriamiento: de 450 a 50°C en 250 s.
 - Velocidad de calentamiento: de 50 a 450°C en 420 s.
- Debe permitir guardar hasta 10 métodos completos y secuencias con la batería back up reteniendo los parámetros de trabajo por un tiempo ilimitado.
- Debe incluir: programación de tiempos con auto-start, diagnosis del instrumento en tiempo real, ayuda en línea para cada parámetro con anotaciones de desviación de la temperatura, presión y flujo y bloqueo del teclado con password.
- Interfase de conexión al Espectrómetro de Masas, termostatazada independientemente hasta 350°C y controlada desde la estación de datos.

Espectrómetro de Masas

- De tipo cuadrupolo Trampa iónica, con ionización externa.
- Rango de masas de 10 a 700 uma, resolución de 1 uma, o mejor según el rango de masas.
- Velocidad de barrido mayor de 5.555 daltons/s y hasta ocho barridos totales por segundo.
- Posibilidad de acoplar sondas para líquidos y sólidos.
- Fuente de iones
- Sintonización compatible con los métodos EPA.
- Imanes colimadores del haz iónico para mayor eficacia ionizadora.
- Control independiente de calentamiento de 125 a 300°C.

Sistema de vacío

- Sistema de vacío con bomba turbo molecular de 250l/s, acoplada a otra bomba de vacío rotatoria de alta capacidad, para conseguir un ínfimo ruido de fondo.
- Acoplamiento MS-MS (n=5)

- Debe incluir monitorización de reacciones seleccionadas (SRM), Ultra SIM y ECD-MS en los dos modos de trabajo EI y CI, que permita mejorar los límites de detección e identificación, así como trabajar en tandem (MS_n, n=1-5).
- Posibilidad de hacer Full Scan MS y MS/MS simultáneamente en el mismo análisis.
- Válvula de entrada Controlada fácilmente por un único botón permitiendo el cambio rápido entre ionización química e impacto electrónico. Auto ajustable.

Muestreador para líquidos y headspace

- El muestreador debe ser capaz de trabajar como inyector de muestras líquidas así como inyector headspace con dos diferentes torres.
- Capacidad para 150 viales de 1,2, 2,5 ml, opcional hasta 300 viales como muestreador automático.
- Inyección en dos inyectores independientes y hasta 3 en dos cromatógrafos.
- Inyección secuencial de dos muestras en dos inyectores.
- Adición automática de patrón interno a la muestra antes de cada inyección.
- Lavado con hasta 4 disolventes, en viales de 10 ml.
- Posibilidad de utilización de jeringas de 5, 10, 100 y 250 µl.
- Volumen de inyección de 0,1 µl a 250 µl.
- Jeringa de 50 mm y jeringa de 80 mm.
- Inyección mediante la técnica "sándwich"
- Métodos programados para los distintos tipos de muestra.
- Muestras volátiles, viscosas.
- Modos split, splitless, on column y grandes volúmenes
- Programación de todos los parámetros de inyección.
- Lector de código de barras.
- Programación de la altura en el vial de muestra de 0-100%
- Programación de la altura de 10 a 80 mm.
- Programación de la velocidad de inyección de 10 a 100 µl/s.
- Programación del "DWEELL TIME" antes y después de la inyección de 0 a 15 seg.
- Programación de limpieza simultáneamente con el proceso cromatográfico.
- Número de prelavados: 0-15
- Capacidad para 54 viales de 10, 20 ml, opcional hasta 108 viales como muestreador de Espacio de Cabeza.
- Las muestras del espacio de cabeza deben poder ser colocadas de una forma secuencial en un incubador con capacidad para 6 muestras.
- Las muestras del headspace deben poder ser transferidas desde el incubador/agitador (40-150°C) a través de una jeringa calefactada (40-150°C), minimizando en ambos el transporte y la descomposición y maximizando la eficacia de la transferencia.
- Debe incluir jeringa de 2,5 ml.
- Kit para inyección sin septa

Microextracción en fase sólida

- Capacidad para 54 viales de 10-20 ml.
- Incubador para 6 viales desde 40 a 50°C.
- Agitación mecánica por movimiento de balanceo.
- Tiempo de extracción hasta 600 min en incrementos de 6 segundos.
- Penetración en el vial variable.
- Máxima profundidad de penetración en el vial: 35 mm.
- Que sea posible la derivatización en la fibra.
- Debe incluir un kit para la inyección SPME.
- Debe incluir 3 fibras de fase PDMS de 100 µm
- Estación acondicionadora de fibra.

Sistema de tratamiento de datos

- Ordenador Pentium IV de 2,8 GHz. (mínimo)
- Memoria RAM de > 1 Gb
- Disco duro de >100 Gb
- Disketera de 1,44 Mb.
- Grabador CD
- Grabador DVD
- Pantalla plana de 17"
- Impresora Láser en blanco/negro para Windows XP
- Programa de control completo del equipo, cuantificación e identificación de compuestos en Windows XP que permita el trabajo en multitarea. Debe incluir programas gráficos de ayuda al mantenimiento del equipo.
- Programa de software Microsoft Office XP (Excel, Power-Point, Word, Acces y Correo)
- Ordenador de control del equipo instalado en red del laboratorio. Debe incluir un SOFTWARE de aplicaciones y control en entorno Windows XP que conste de:
 - Software para análisis de compuestos según protocolos EPA.

- Paquete de cuantificación.
- Software de adquisición de datos y control de los instrumentos (incluyendo el HRGC y muestreadores).

Otros accesorios:

- Sonda de intercambio de volumen iónico, que incluya 2 volúmenes iónicos para cambio del volumen iónico, para mantenimiento o sustitución del modo de ionización, sin rotura del vacío.
- Medidor de presión Granville-Philips (Ion Gauge), que mida la presión en el interior de la fuente.
- Variable Damping Gas en el interior de la trampa de iones, que incremente la sensibilidad del sistema hasta 5 veces
- Adquisición MS/MS con ADC y PQD incorporado. Sistema ADC- automated collision energy- que optimice la energía de colisión para el ión precursor seleccionado; Sistema PQD- Pulse Q Dissociation mode- ayudando a obtener mayor información espectral a masas bajas.
- Librería NIST en CD ROM, instalada en el ordenador.
- Librería Pesticidas.
- Columnas cromatográficas (2) para GC/MS.
- Caja de insonorización para bomba externa al sistema.

3- Otras características

Sensibilidad

EI (CG/MS): Una inyección en modo splitless de 1 pg de decafluorobenzofenona en isooctano debe producir un pico cromatográfico de menos de 4s de anchura a media altura. En estas condiciones la relación señal ruido para el ión molecular m/z 362 debe ser mejor que 100:1, cuando un espectro completo es continuamente adquirido desde 60 a 400 daltons con un ciclo de 0,5 seg.