

Marktconsultatie

State-of-the-art highly-sensitive mass spectrometer for metabolomics and proteomics

Datum versie: 4 maart 2022



Inhoudsopgave

1. Achtergrondinformatie betreffende de aanvraag.....	3
2. Specificatie-eisen gevraagde levering	3
2.1 Algemene beschrijving van het systeem	3
2.2 De massaspectrometer moet de volgende onderdelen bevatten	4
2.3 Software and operating system	7
2.4 Service	8
2.5 Levering	8
2.6 Prijs	8
3. Procedure en tijdsplan van de marktconsultatie	8
4. Overige bepalingen en voorwaarden	9

1. Achtergrondinformatie betreffende de aanvraag

De Vrije Universiteit Amsterdam (VU) is een innovatieve universiteit die midden in de samenleving staat en actief bijdraagt aan de ontwikkelingen in onderwijs en onderzoek. Onze breed georiënteerde universiteit telt verschillende faculteiten, instituten, stichtingen, onderzoekscentra en ondersteunende diensten. Aan de VU volgen ruim 25.000 studenten wetenschappelijk onderwijs en werken ca. 2.750 wetenschappelijke personeelsleden en 1.900 personeelsleden in niet-wetenschappelijke functies. Voor meer informatie over de VU, zie www.vu.nl.

Het Amsterdam Institute for Molecular and Life Sciences (AIMMS) heeft als missie fundamenteel inzicht te verwerven in moleculen en hun interactie met biologische systemen om de menselijke gezondheid en het milieu te verbeteren. AIMMS integreert verschillende disciplines om chemische en biologische processen te begrijpen, moduleren en gebruiken. Binnen AIMMS dragen we bij aan twee grote onderzoeksthema's van de VU: Human Health and Life Sciences en Science for Sustainability.

Binnen AIMMS richten twee nieuwe onderzoekslijnen (Kohler en Moco) zich op metabolomics, inclusief untargeted en targeted benaderingen. Voor deze projecten is een zeer gevoelige, nauwkeurige massaspectrometer met hoge resolutie nodig om de ondubbelzinnige identificatie en nauwkeurige kwantificering van duizenden metabolieten in complexe biosamples te bereiken. Hetzelfde systeem zal worden gebruikt voor proteomics-toepassingen (Kool).

Het doel van deze marktconsultatie is om na te gaan hoeveel potentiële leveranciers er zijn om zodoende richting te geven aan welke aanbestedingsprocedure de Vrije Universiteit Amsterdam moet volgen voor deze aankoop. Daarom vragen we de potentiële leveranciers om hun **technische productspecificaties te leveren gebaseerd op alle hieronder genoemde specificatie-eisen**.

Gegadigden worden uitgenodigd om op basis van de verstrekte informatie een reactie te geven met inachtneming van de verstrekte specificaties ten aanzien van onder andere de levering, de dienstverlening en de voorwaarden.

Mocht u na opvragen van de informatie toch besluiten niet verder te reageren, dan verzoeken wij u vriendelijk dit aan ons te melden.

Voor alle duidelijkheid: het betreft hier **GEEN** offerteaanvraag.

2. Specificatie-eisen gevraagde levering

2.1 Algemene beschrijving van het systeem

We request a highly sensitive, high-resolution mass spectrometer with high mass accuracy for the unambiguous identification and accurate quantitation of thousands of metabolites in complex biological samples.

The involved projects will encompass untargeted and targeted metabolomics, as well as proteomics applications.

For untargeted metabolomics and proteomics, the instrument needs to enable the unambiguous identification of metabolites and peptides in complex matrices, using conventional (collision-induced

dissociation, CID) and reagent-free alternative (electron capture dissociation, ECD; “hot ECD”; and electron impact excitation of ions from organics, EIEIO) fragmentation approaches. The instrument must contain a time-of-flight (TOF) mass analyzer and enable sequential window acquisition of all theoretical mass spectra (SWATH) acquisition mode. The instrument must have an internal mass accuracy of <0.2 and <0.5 ppm for the fragment ions m/z 813 and m/z 120 of Glu-Fibrinopeptide B, respectively.

For targeted metabolomics and proteomics, the scan speed for TOF-MS/MS must be >100 Hz to ensure the accurate quantitation of a large number of metabolites and peptides (> 300 metabolites) per run. The duty cycle (TOF-MS/MS) must be >90% for all ions, to enhance the sensitivity. The linear dynamic range must be ≥ 5 orders of magnitude in both ESI positive and negative modes. For both untargeted and targeted approaches, the sensitivity must be sufficiently high to allow for the detection and accurate quantitation of metabolites and peptides present at trace concentrations in biosamples. Therefore, the sensitivity must reach the following signal-to-noise (S/N) ratios: $S/N \geq 2500:1$ using an ESI probe in full-scan TOF MS mode with a mass extraction window of 10 mDa for m/z 609.2806 for a 1 pg reserpine injection on column (ESI positive mode), and $S/N \geq 1000:1$ using an ESI probe in full-scan TOF MS mode with a mass extraction window of 10 mDa for m/z 321.0050 for a 100 fg chloramphenicol injection on column (ESI negative mode).

For proteomics, the instrument must have a TOF mass range capable of reaching up to 40 kDa. The instrument must be equipped with an ESI source enabling the use of flow rates at the nL/min range.

For metabolomics and proteomics applications, the instrument must provide the following acquisition modes: TOF MS/MS, MRM^{HR} , data independent acquisition (DIA)/SWATH scan mode using fixed and variable window acquisitions, and information dependent acquisition (IDA)/data dependent acquisition (DDA) scan modes.

The manufacturer needs to prove their ability to deliver a machine with above properties through peer-reviewed academic publications.

2.2 De massaspectrometer moet de volgende onderdelen bevatten

1. Mass spectrometer

1.1. Analyzer

The instrument must contain a single narrow aperture from atmosphere into the vacuum chamber, an ion guide followed by a high-pressure RF quadrupole and a quadrupole mass filter. An ECD cell and high-pressure quadrupole collision cell with LINAC collision cell technology follows the first mass filter and is used for high efficiency CID and electron activated dissociation (EAD) MS/MS fragmentation.

The second mass analyzer must be a high-performance N-optic TOF analyzer, comprised of a 21 kHz pulser with 6 kV acceleration voltage.

1.2. Scan types

The instrument must offer full-scan MS and MS/MS or product ion scans, Q1 scans, DIA/SWATH acquisition with fixed or variable windows, MRM^{HR} and IDA/DDA.

1.3. Fragmentation modes

The instrument must contain an EAD cell and a high-pressure quadrupole collision cell. The instrument must be able to switch between EAD and CID through user selection.

EAD must be user-selectable with the following scan types: full-scan MS/MS, MRM^{HR}, IDA/DDA and DIA/SWATH acquisition.

1.4. Interface

The instrument must have a direct atmosphere-to-vacuum interface module with a gas barrier for maintaining analyzer cleanliness and optimizing ion declustering. It must be capable of analyzing large batches of complex samples over long periods of time without maintenance or performance degradation.

2. System performance

2.1. Mass range

The instrument must have a TOF mass range of up to 40 kDa.

It must have a precursor ion selection mass range (m/z) of 5–2,250 Da.

2.2. Scan speed TOF MS

The instrument must have a maximum scan speed of up to 25 Hz (25 spectra per second).

2.3. Scan speed TOF MS/MS

The instrument must have a maximum scan speed of up to 133 Hz (133 MS/MS spectra per second).

2.4. Mass resolution

The instrument must have a mass resolution that is equal to or greater than 42,000 (FWHM) measured on the (M+6H)⁶⁺ charge isotope cluster for bovine insulin at m/z 956.

2.5. MS/MS duty cycle

The instrument must contain a Zeno trap that allows a $\geq 90\%$ duty cycle for TOF MS/MS acquisition. This must be available for full-scan MS/MS, MRM^{HR} and IDA/DDA.

2.6. MS/MS scan speed DIA/SWATH acquisition

The instrument must have a maximum scan speed of up to 200 MS/MS scans per cycle in data independent mode (DIA) or with SWATH acquisition for both fixed window and variable window methodologies.

2.7. Linear dynamic range (LDR) positive mode

The instrument must have a dynamic range of ≥ 5 orders of magnitude from the limit of detection (LOD) without a signal reduction for both TOF MS and TOF MS/MS

2.8. Linear dynamic range (LDR) negative mode

The instrument must have a dynamic range of ≥ 5 orders of magnitude from the limit of detection (LOD) without a signal reduction for both TOF MS and TOF MS/MS.

2.9. Mass accuracy, internal

The instrument must have a mass accuracy of ≤ 0.2 ppm absolute error as demonstrated on the m/z 813 fragment ion of Glu-Fibrinopeptide B.

The instrument must have a mass accuracy of ≤ 0.5 ppm absolute error as demonstrated on the m/z 120 fragment ion of Glu-Fibrinopeptide B.

2.10. Mass accuracy, internal positive and negative mode

The instrument must have a mass accuracy of < 0.5 ppm RMS error of all peaks combined, when the spectrum has been internally calibrated over a mass range of m/z 100–2,000.

2.11. Positive mode TOF MS ESI sensitivity

Using the ESI probe in full-scan TOF MS mode with a mass extraction window (MEW) of 10 mDa for m/z 609.2806 for a 1 pg reserpine injection on column, the instrument must have a $S/N \geq 2,500:1$.

S/N measurements are calculated based on 1 standard deviation of at least 3 points of noise, which produces the smallest standard deviation, after applying up to 3 Gaussian smooths.

2.12. Positive mode TOF MS/MS ESI sensitivity

Using the ESI probe in full-scan MRMHR mode with a MEW of 10 mDa for the transition m/z 609 to m/z 195.0651 for a 50 fg reserpine injection on column, with precursor isolation at unit mass resolution (0.7 ± 0.1 Da at half height), the instrument must have a $S/N \geq 400:1$.

S/N measurements are calculated based on 1 standard deviation of at least 3 points of noise, which produces the smallest standard deviation, after applying up to 3 Gaussian smooths.

2.13. Negative mode TOF MS sensitivity

Using the ESI probe in full-scan TOF MS mode with a MEW of 10 mDa for m/z 321.0050 for a 100 fg chloramphenicol injection on column, the instrument must have a $S/N \geq 1,000:1$.

S/N measurements are calculated based on 1 standard deviation of at least 3 points of noise, which produces the smallest standard deviation, after applying up to 3 Gaussian smooths.

2.14. Negative mode TOF MS/MS sensitivity

Using the ESI probe in full-scan MRMHR mode with a MEW of 10 mDa for the transition m/z 321 to m/z 152.0350 for a 100 fg chloramphenicol injection on column, with precursor isolation at unit mass resolution (0.7 ± 0.1 Da at half height), the instrument must have a $S/N \geq 1,500:1$.

S/N measurements are calculated based on 1 standard deviation of at least 3 points of noise, which produces the smallest standard deviation, after applying up to 3 Gaussian smooths.

2.15. EAD electron energy

The instrument must contain a user-tunable electron-based fragmentation mode operating at electron energies from 0 eV to 25 eV.

2.16. Scan modes supported by EAD

The instrument must support full-scan TOF MS/MS, MRMHR, DIA/SWATH acquisition and IDA/DDA scan modes with EAD

3. Ion source

The instrument must contain an OptiFlow Turbo V ion source, or equivalent providing the same performance.

3.1. Functionality

3.1.1. The ion source is a low-flow source with probes and electrodes designed for minimal sample consumption and the highest sensitivity at flow rates from 100 nL/min to 200 μ L/min. It requires no tools and no physical adjustments. The probes/electrodes have pre-optimized locations and are changed to achieve different flow ranges. The system has the option of 3 probes (for flow ranges between 100–1,000 nL/min, 1–50 μ L/min and 50–200 μ L/min) and 4 electrodes (for flow ranges between 100–1,000 nL/min, 1–10 μ L/min, 10–50 μ L/min and 50–200 μ L/min). Column heaters for micro columns (up to 15 cm in length) and nano columns will provide heating up to 90 °C.

3.1.2. The ion source is resistance-coded for automated identification by firmware/software.

3.1.3. The ion source has flow rate compatibility from 100 nL/min to 200 μ L/min without flow splitting.

3.1.4. The ion source allows the system to recognize the correct probe when inserted into the source.

3.1.5. The ion source column heaters heat from ambient +5 °C to 90 °C within 25 minutes.

3.1.6. The column heaters are controlled by the mass spectrometry control system.

2.3 Software and operating system

1. Data system

1.1. The system must include a Windows-based data acquisition and editing software package that incorporates a graphical user interface utilizing multi-pane windows for easy data acquisition and analysis.

1.2. The system must be compatible with a variety of commercially available LC pumps, autosamplers and detectors.

1.3. The system is capable of easy, automated optimization of quadrupole and TOF calibration and resolution as well as optimized detector settings.

1.4. The system has dynamic background subtraction (DBS) to minimize the collection of MS/MS on background ions to increase the identification of low-level analytes in the presence of background noise.

1.5. The system has multiple mass defect-triggered information dependent acquisition (IDA/DDA) to improve efficiency and reduce the need for multiple injections to get comprehensive information.

1.6. The system can acquire data-independent MS/MS^{ALL} with DIA/SWATH acquisition, where high-quality MS/MS spectra are generated for all masses over a specified range. A resolving Q1 window is stepped across a mass range and a high-resolution accurate mass MS/MS spectrum is obtained at each mass step. The system must be able to acquire up to 200 windows per cycle, and the window width must be variable, as defined by the user. Combined with high-resolution TOF-MS data, this workflow enables the acquisition of MS and MS/MS spectra of all detectable analytes.

1.7. The system has automated batch calibration to maintain mass accuracy during long runs by automatically calibrating the system.

2.4 Service

- a) Warranty of 1 year for the instrument.
- b) Free software upgrades during warranty
- c) Phone and remote support is always available.

2.5 Levering

De “State-of-the-art highly-sensitive mass spectrometer for metabolomics and proteomics” is leverbaar binnen 6 weken na bestelling.

2.6 Prijs

De aanschafprijs omvat alle kosten, zoals installatie en implementatie, levering, garanties, training en documentatie, eventuele extra kosten voor reizen, accommodatie en testen.

3. Procedure en tijdsplan van de marktconsultatie

Tijdens de marktconsultatie verloopt alle communicatie met betrekking tot dit onderwerp via de afdeling inkoopmanagement van de Vrije Universiteit. Contactgegevens, zie onderstaand:

Naam:	Afdeling Inkoopmanagement
Faculteit / Dienst:	Dienst Financiën
Adres:	Van der Boechorststraat 1 1083 BT Amsterdam
E-Mail:	aanbestedingen@vu.nl
Onder vermelding van	<u>Marktconsultatie State-of-the-art high-sensitive mass spectrometer for metabolomics and proteomics</u>

Tijdsplan Marktconsultatie:

Omschrijving	Uiterste datum en tijd

Publicatie op www.tenderned.nl	4 maart 2022
Deadline voor het stellen van vragen	11 maart 2022, 10:00 uur
Publicatie Nota van Inlichtingen	16 maart 2022
Laatste moment van insturen antwoorden	25 maart 2022, 10:00 uur
Versturen samenvatting naar deelnemers en sluiting van het marktconsultatietraject	8 april 2022

U wordt verzocht om uiterlijk op 25 maart 2022, 10:00 uur te reageren op deze marktconsultatie. Reacties die na deze termijn binnenkomen worden niet meer in behandeling genomen.

De VU wil u in gelegenheid stellen eventuele vragen omtrent deze marktconsultatie te stellen.

Dit kunt u doen tot uiterlijk 11 maart 2022, 10:00 uur per e-mail. U dient uw aanmelding en vragen per e-mail te sturen aan aanbestedingen@vu.nl ter attentie van de afdeling Inkoopmanagement.

Bij het indienen van uw reactie vermeldt u in het onderwerp **‘State-of-the-art highly-sensitive mass spectrometer for metabolomics and proteomics’**.

Antwoord op de vragen zal middels een nota van inlichtingen gepubliceerd worden op Tendered, uiterlijk op 16 maart 2022.

De VU houdt de optie open om naar aanleiding van de ingediende reacties partijen uit te nodigen om mondeling en/of met een presentatie een aanvullende toelichting te geven op uw antwoorden. De VU zal contact opnemen met deze partijen en in overleg een gesprek inplannen.

De uitkomsten van de marktconsultatie kunnen worden gebruikt als input van een eventueel te volgen aanbesteding. Na afloop van de marktconsultatie wordt aan alle reflectanten een schriftelijke terugkoppeling van de marktconsultatie gegeven in de vorm van een samenvatting van de antwoorden, rekening houdende met eventuele commerciële belangen van de partijen. Deze terugkoppeling doet geen afbreuk aan de vrijblijvendheid van de marktconsultatie. Prijzen en/of tarieven zijn uitgesloten van bekendmaking.

Gegadigden, die hebben deelgenomen aan deze marktconsultatie en de vragen hebben beantwoord, ontvangen de samenvatting via e-mail, uiterlijk 8 april 2022.

Deze samenvatting wordt ook als bijlage bij een eventueel te volgen aanbesteding gepubliceerd.

4. Overige bepalingen en voorwaarden

Naast de elders vermelde voorwaarden en bepalingen in dit document zijn op deze marktconsultatie de volgende overige voorwaarden en bepalingen van toepassing:

- partijen kunnen aan deze marktconsultatie geen (wederzijdse) verplichtingen of rechten jegens de VU ontleen;

- deelname aan deze marktconsultatie biedt geen enkel recht op het verkrijgen van een opdracht;
- eventuele kosten voor de deelname aan deze marktconsultatie worden niet vergoed door de VU;
- de voertaal tijdens deze marktconsultatie is in principe Nederlands;
- de VU is op geen enkele wijze gebonden aan de uitkomsten van de marktconsultatie of verplicht tot realiseren en/of aanbesteden van het onderwerp waarop de marktconsultatie betrekking heeft;
- claims over het gebruik van informatie, vertrouwelijkheid of verzoeken om vergoeding in verband hiermee worden niet gehonoreerd;
- de VU behoudt zich het recht voor deze marktconsultatie tijdelijk of definitief te staken.