

	Hochschule Merseburg INW 144/26 – Hochleistungsflüssigkeitschromatograph (HPLC) C.1_Leistungsbeschreibung Offenes Verfahren gem. § 15 VgV	
---	---	---

Leistungsbeschreibung

Gegenstand der Beschaffung

Beschafft wird ein hochauflösendes LC/MS/MS-System mit zwei HPLC-Systemen zur Identifizierung und Quantifizierung im Targeted- und Non-Targeted-Screening.

Das System muss insbesondere für PFAS-Anwendungen sowie für Forschungsanwendungen in der Lebensmittel-, Arzneimittelrückstands- und Umweltanalytik geeignet sein.

Funktional gleichwertige oder technisch überlegene Lösungen sind zulässig, soweit dies bei den nachstehenden Anforderungen ausdrücklich vorgesehen ist oder die Gleichwertigkeit durch den Bieter nachgewiesen wird.

Spezifikationen

HPLC 1:

- 1) Alle Komponenten müssen für einen Druckbereich von mehr als 650 bar ausgelegt sein.
- 2) Alle Komponenten müssen für die Rückstands- und Spurenanalytik von PFAS geeignet sein, beispielsweise im Hinblick auf die Anforderungen der Trinkwasserverordnung 2023 in der novellierten Fassung vom 12.01.2026.
- 3) Temperierter Autosampler mit einem Temperaturbereich von 5 °C bis 40 °C.
- 4) Injektionsvolumen von 0,01 µl bis 100 µl; optional bis 1.000 µl.
- 5) Kapazität für mindestens 100 Probenvials mit einem Volumen von jeweils 1,8 ml.
- 6) Quaternäre Pumpe mit einem Flussbereich von mindestens 0,01 ml/min bis 5 ml/min.
- 7) Degasser.
- 8) Säulenthermostat mit einem Temperaturbereich von mindestens 5 °C bis 80 °C sowie Platz für mindestens zwei Trennsäulen bis jeweils 250 mm Länge.
- 9) Für PFAS-Anwendungen geeignete Trennsäule.
- 10) Geeignet für Anschluss und Betrieb mit dem angebotenen Massenspektrometer.

	Hochschule Merseburg INW 144/26 – Hochleistungsflüssigkeitschromatograph (HPLC) C.1_Leistungsbeschreibung Offenes Verfahren gem. § 15 VgV	
---	---	---

- 11) Minimierung von PFAS-Systemkontaminationen: Das HPLC-System muss herstellerseitig so modifiziert oder mit einem geeigneten PFAS-Ausschuss- oder Umrüstkit ausgestattet sein, dass fluorpolymerhaltige Komponenten, beispielsweise PTFE-Schläuche, klassische Entgaser-Membranen oder Fritten, die zu PFAS-Hintergrundkontaminationen führen können, durch inerte Alternativen, beispielsweise PEEK, Edelstahl oder andere PFAS-freie Materialien, ersetzt oder umgangen werden.
- 12) Hintergrund-Verzögerungssäule: Im Lieferumfang muss eine hochdruckfeste Verzögerungs- beziehungsweise Isolatorsäule enthalten sein. Diese ist im Flussweg nach der Pumpe und vor dem Probeninjektor zu installieren, um system- oder lösemittelbedingte PFAS-Hintergrundsignale chromatographisch sicher von den Analytenpeaks der Probe trennen zu können.

HPLC 2:

- 1) Alle Komponenten müssen für einen Druckbereich von mehr als 650 bar ausgelegt sein.
- 2) Autosampler.
- 3) Injektionsvolumen von 0,01 µl bis 100 µl; optional bis 1.000 µl.
- 4) Kapazität für mindestens 100 Probenvials mit einem Volumen von jeweils 1,8 ml.
- 5) Quaternäre Pumpe mit einem Flussbereich von mindestens 0,01 ml/min bis 5 ml/min.
- 6) Degasser.
- 7) Säulenthermostat mit einem Temperaturbereich von mindestens 5 °C bis 80 °C sowie Platz für mindestens zwei Trennsäulen bis jeweils 250 mm Länge.
- 8) Diodenarray-Detektor mit einstellbaren Datenraten bis zu 100 Hz, einer Flusszelle mit mindestens 5 mm Lichtweg und einem Wellenlängenbereich von mindestens 190 nm bis 800 nm. Ein Diodenarray-Detektor mit nachweislich gleichwertiger oder besserer analytischer Leistungsfähigkeit ist ebenfalls zulässig.
- 9) Trennsäule mit einer Länge von 150 mm bis 200 mm, RP-C18 oder vergleichbar.
- 10) Geeignet für Anschluss und Betrieb mit dem angebotenen Massenspektrometer.

Massenspektrometer:

	Hochschule Merseburg INW 144/26 – Hochleistungsflüssigkeitschromatograph (HPLC) C.1_Leistungsbeschreibung Offenes Verfahren gem. § 15 VgV	
---	---	---

- 1) Hochauflösendes System für qualitative und quantitative Analysen.
- 2) Kombination aus einem Quadrupol zur Ionenselektion und einem hochauflösenden Massenanalysator; hochauflösende Full-Scan- und MS/MS-Messungen müssen möglich sein.
- 3) Vorläuferionenselektion mit hoher Selektivität und Transmissionseffizienz zur Optimierung der Messempfindlichkeit. Die Einstellungen müssen softwaregestützt dokumentierbar sein. Das System muss verschiedene Datenerfassungsmodi, SIM- und zielgerichtete MS/MS-Methoden sowie einen schnellen Wechsel zwischen positiver und negativer Ionisationspolarität innerhalb einer Messsequenz ermöglichen.
- 4) Elektrospray-Ionisationsquelle (ESI); nutzbarer Massenbereich von mindestens m/z 40 bis m/z 5.000; maximale Auflösung von mehr als 120.000 FWHM bei m/z 200; Massengenauigkeit bei interner Kalibrierung von höchstens 1 ppm; Quantifizierung im Full-Scan-Modus und Screening nach unbekannten PFAS.
- 5) Empfindlichkeit für 1 pg Reserpin mit einem Signal-Rausch-Verhältnis von mehr als 300 : 1. Der Nachweis ist durch ein aktuelles Herstellerdatenblatt oder eine verbindliche Herstellererklärung für die angebotene Gerätekonfiguration zu führen.
- 6) APCI-Ionenquelle optional. Sofern eine APCI-Ionenquelle zur Erreichung eines Qualitätspunktes (Unterlage B.2_Zuschlagskriterien und Erläuterungen) angeboten wird, ist diese vollständig, betriebsbereit und ohne zusätzliche Vergütung mitzuliefern.

Peripherie, Extras und Datensystem:

- 1) Stickstoffgenerator mit ausreichender Reinheit und Kapazität für den Betrieb des gesamten LC/MS-Systems.
- 2) Für den Betrieb erforderliche Hard- und Software, einschließlich PC mit Windows 11, 27-Zoll-Monitor, Tastatur und Maus.
- 3) Bedienungssoftware für das LC/MS-System bestehend aus HPLC 1 und Massenspektrometer sowie für die Steuerung der HPLC 2 und deren Einbindung als HPLC-2/MS-System.
- 4) Software zur automatisierten Datenprozessierung hochaufgelöster MS-Full-Scan- und MS/MS-Daten für das nichtzielgerichtete Screening und die Identifizierung kleiner Moleküle. Die Software muss eine grafische oder vergleichbar nachvollziehbare Workflow-Umgebung bieten. Einzelne Verarbeitungsschritte, insbesondere Peak-

	Hochschule Merseburg INW 144/26 – Hochleistungsflüssigkeitschromatograph (HPLC) C.1_Leistungsbeschreibung Offenes Verfahren gem. § 15 VgV	
---	---	---

Ausrichtung, Isotopen-Gruppierung, Hintergrund-Subtraktion und Bibliotheksabgleich, müssen flexibel zu Prozessketten kombiniert, gespeichert und als Vorlagen wiederverwendet werden können. Eine Knoten- beziehungsweise Node-basierte Workflow-Architektur ist zulässig, aber nicht zwingend erforderlich.

- 5) Umfassende Datenbank für niedermolekulare Verbindungen und Software für die Suche nach unbekannten Verbindungen. Das Gesamtsystem muss Zugriff auf eine spektrale Datenbasis mit mindestens 500.000 hochaufgelösten MS/MS- oder MS⁰-Referenzspektren für kleine Moleküle bieten.

Die Anforderung kann erfüllt werden durch:

- a) lokal installierte, herstellereigene oder vollständig integrierte kommerzielle Standarddatenbanken; oder
- b) einen direkt aus der Software nutzbaren und vollständig integrierten Online- oder Cloud-Zugriff auf eine entsprechend kuratierte Massenspektrenbibliothek.

Eine gleichwertige kuratierte Spektrenbibliothek ist zulässig.

- 6) Aufbau, Installation und Inbetriebnahme bis zum Status eines messfertigen Systems.
- 7) Einweisung von etwa drei bis vier Beschäftigten des Laborpersonals in das Messsystem im Rahmen der Installation für mindestens drei Tage.
- 8) Applikationsunterstützung für etwa drei bis vier Beschäftigte des Laborpersonals für mindestens zwei Tage.
- 9) Basissatz an Werkzeugen und Verbrauchsmaterialien für den Messbetrieb im ersten Jahr.
- 10) Handbücher und Softwaredokumentation, auch als PDF-Dateien möglich; die Software soll wahlweise in deutscher oder englischer Sprache nutzbar sein.
- 11) Drei Jahre Gewährleistung für das gesamte LC-MS-System einschließlich zweier Wartungen innerhalb des Gewährleistungszeitraums.

Technische Details des gesamten Systems bitten wir Sie, in frei gewählter Form dem Angebot beizulegen.