

**PLIEGO TECNICO**

**SUMINISTRO DE PAQUETE SOFTWARE PARA CONSOLA DE  
RADIOFRECUENCIA**

**1. OBJETO**

Paquete de software para el pre-procesado, corregistrado, análisis estadístico y asignación de resonancias de espectros adquiridos en Consolas de Radiofrecuencias Bruker AVANCE III.

**2. CARACTERISTICAS TÉCNICAS**

**Programa informático para procesado y pre-análisis de espectro de RMN para metabolómica.**

- 1) Evaluación de múltiples modalidades de datos de RMN de hasta 4 dimensiones
- 2) Herramientas de análisis de espectros incluyendo álgebra de espectros, reconocimiento de patrones, exploración de patrones, herramientas de alta rendimiento, análisis de pico completo y de multipletes, comparación de datos espectroscópicos
- 3) Herramientas manipulación de espectros y gestión de datos para preparar espectros y construir sus propias bases de datos espectrales
- 4) Interfaz SQL para almacenar y utilizar los espectros directamente en una base de datos ORACLE
- 5) Herramientas para la cuantificación relativa o absoluta de resonancias incluyendo integración de picos por análisis de forma de la línea, el modelado de pico, métodos de máxima entropía y cuantificación de patrones
- 6) Modo de comando para cálculo de diezmado de espectros, cálculo de compartimentos, coincidencia de espectros que se pueda ejecutar desde el entorno Topspin mediante scripts au

**Base de datos espectral de metabolitos para asignación de resonancias e identificación de picos**

- 1) La base de datos ha de contener espectro de compuestos que se encuentren típicamente en forma de metabolitos en los fluidos corporales con un mínimo de 500 compuestos.
- 2) La base de datos ha de contener espectros de posibles contaminantes típicos.
- 3) Los datos de RMN de la base de datos deben haberse adquirido en un espectrómetro Bruker AVANCE III 600MHz cpara compatibilidad con los generados en la plataforma.
- 4) Los espectros se habrán adquirido a distintas condiciones de pH (de 3 a 8).
- 5) La base de datos ha de incluir espectros 1H, espectros 2D (JRES, ACOGEDOR, TOCSY, HSQC y HMBC) y espectros de 13C
- 6) Los compuestos cuyo espectro esté en la base de datos han de incluir su estructura 3D.
- 7) Los espectros deben estar totalmente asignados.
- 8) La base de datos debe poder ser actualizada y ampliada con paquetes de nuevos compuestos disponibles.

