

## Příloha č. 1

### Technické podmínky

#### Veřejná zakázka: „Knihovna chemických sloučenin“

##### ***Plná specifikace a technické požadavky zadavatele veřejné zakázky***

##### **1. Zadavatel požaduje od uchazeče před podpisem smlouvy jako nedílnou součást nabídky:**

**a)** Dodání seznamu 45 000 chemických sloučenin (dále jen knihovna látek) z dodavatelem uveřejněného soupisu chemických sloučenin o celkovém počtu 443 324, které je uchazeč schopen dodat dle dalších technických podmínek.

Celkový soupis sloučenin zadavatele ve formátu CSV s názvem „Seznam látek pro knihovnu chemických sloučenin“ bude uchazeči přístupný na adrese <https://owncloud.cesnet.cz> po písemném vyžádání. Zadavatel umožňuje uchazeči nabídnout i farmaceutiky používané soli, které se neliší účinkem od volné báze/kyseliny.

Seznam nabízené knihovny látek bude uchazečem dodán na CD-ROM (DVD), které bude označeno názvem „Knihovna chemických sloučenin - nabídka“, identifikačními údaji a názvem uchazeče. Dodavatelem uvedených 45 000 chemických sloučenin bude předmětem plnění v kupní smlouvě.

**b)** Dodání vyplněné tabulky „Data pro stanovení čistoty látek“ vypovídající o čistotě nabízené knihovny látek (dále jen čistota knihovny) spolu s certifikátem analýzy pro celou nabízenou knihovnu látek. Čistota knihovny látek bude činit minimálně 90 % na základě LC/MS (PDA měření v rozsahu 200-400 nm a/nebo ELSD), GC/MS nebo <sup>1</sup>H-NMR.

Zadavatel uvádí šablonu tabulky „Data pro stanovení čistoty látek“ na konci tohoto dokumentu. Uchazeč si tabulku vytiskne, ručně a čitelně vyplní všechny požadované údaje (název, sídlo a další identifikační údaje uchazeče a sloupec „Četnost“, neboli počet chemických sloučenin pro jednotlivé hodnoty čistoty v intervalu 90 až 100 % s inkrementem 1 %) a odešle ji zadavateli spolu s vytištěným certifikátem analýzy pro celou nabízenou jako nedílnou součást nabídky.

Doložení vyplněné tabulky „Data pro stanovení čistoty látek“ a certifikátu analýzy je součástí hodnocení nabídek uchazečů.

Z dodané tabulky o čistotě chemických sloučenin vypočítá zadavatel hodnotu váženého průměru dle níže uvedeného postupu. Ten bude odrážet čistotu knihovny a sloužit pro hodnocení nabídky uchazeče.

Zadavatel definuje čistotou knihovny jako početní zastoupení (četnost) chemických sloučenin ze 45 000 uchazečem nabízených látek pro danou čistotu v intervalu od 90 do 100 % s inkrementem 1 %.

Pro výpočet váženého průměru použije zadavatel tento vzorec:

$$\bar{x} = \frac{\sum_{i=1}^n w_i \cdot x_i}{\sum_{i=1}^n w_i}, \text{ kde}$$

$\bar{x}$  je vážený průměr čistoty knihovny chemických sloučenin,

$x$  je čistota v intervalu 90 až 100 % s inkrementem 1 %,

$w$  je zastoupení (četnost) látek pro danou čistotu.

Zadavatel zaokrouhlí vypočtený vážený průměr na dvě desetinná místa. Pokud bude třetí číslo zprava za desetinnou čárkou vyšší nebo rovno 5, zaokrouhluje se nahoru.

**2. V okamžiku podpisu kupní smlouvy předmětu veřejné zakázky požaduje zadavatel od dodavatele skladovou dostupnost každé z dodaných chemických sloučenin v množství  $\geq 10$  miligramů (mg).**

**3. Zadavatel zajišťuje uchazeči po doručení elektronické dokumentace (viz bod 4a) dodání zkumavek a stojánků pro jejich plnění zakoupenými chemickými sloučeninami (viz bod 4b).**

**4. Po podpisu smlouvy jako součást plnění zadavatel požaduje od nasmlouvaného dodavatele:**

**a)** Do 10 kalendářních dnů od podpisu smlouvy zaslání elektronické dokumentace, kterou se rozumí:

- textový soubor pro mapování látek ve formátu **CSV** (oddělovač čárka) obsahující minimálně tyto headery: **id** (= unikátní interní identifikátor sloučeniny od dodavatele), **source** (= název dodavatele – přesný formát bude zadavatelem upřesněn po oboustranném podpisu smlouvy), **platename** (= číselné nebo slovní označení stojánku), **position** (= pozice/souřadnice zkumavky se sloučeninou ve stojánku), **barcode** (= 2D čárový kód zkumavky), **smiles** (jednoznačný popis struktury molekul pomocí řetězců znaků ASCII ve formátu SMILES). V případě dodání látky ve formě farmaceuticky akceptovatelné soli, bude struktura látky obsahovat kompletní molekulu, tzn. kationt i aniont.

- příslušná analytická data pro každou chemickou sloučeninu dokazující jejich čistotu (chromatogramy nebo NMR spektra). Čistota každé chemické sloučeniny bude činit minimálně 90 % na základě LC/MS (PDA měření v rozsahu 200-400 nm a/nebo ELSD), GC/MS nebo  $^1\text{H-NMR}$ . Data budou uložena v jednotlivých souborech formátu **PDF** o maximální velikosti 100 kB. Každý soubor bude pojmenován dodržáním standardizovaného syntaxu: „**id\_source\_analysis-data.pdf**“ (id = interní identifikátor

látky od dodavatele – stejný jako mapovacím souboru CSV, source =název dodavatele, přesný formát bude upřesněn).

Dodavatel uloží elektronickou dokumentaci na CD-ROM (DVD), které označí názvem „Elektronická dokumentace“, názvem veřejné zakázky, názvem a identifikačními údaji dodavatele a zašle na adresu zadavatele.

Po doručení elektronické dokumentace na adresu zadavatele označí zadavatel stojánky s prázdnými zkumavkami pomocí číselného kódu ve formátu „CP-XXXXXX“ a čárového kódu ve formátu Code 39 a zašle je dodavateli na jeho adresu k naplnění zakoupenými sloučeninami.

**b)** Naplnění 45 000 sloučenin do zkumavek ve stojáncích a jejich dodání na adresu zadavatele dle níže uvedených specifikací do 40 kalendářních dnů od data doručení označených prázdných zkumavek:

- Dodání chemických sloučenin ve formátu 96 jamek. Sloučeniny budou naplněny do bezbarvých polypropylenových zkumavek o objemu 1 ml se šroubovacími víčky a 2D čárovými kódy (formát DataMatrix) na jejich dně, které má tvar „V“ (Thermo Scientific™ Matrix™ 1.0mL ScrewTop Tubes). Zkumavky budou uloženy v plastových ANSI kódovaných stojáncích (Matrix 2D Barcoded Screw Top Storage Tubes & Caps) s uzamykatelným víkem pro výše uvedené zkumavky.

- Plnění do zkumavek ve stojáncích po sloupcích č. 1 až č. 11. ve směru A1 až H1, A2 až H2, ..., A11 až H11. Poslední sloupec č. 12 bude ponechán prázdný, tzn. v každém stojánku bude 88 zkumavek s chemickými sloučeninami.

- Dodání každé jednotlivé dílčí látky rozpuštěné v dimethylsulfoxidu (DMSO) o objemu 500 µl roztoku a koncentraci 0,01 mol/dm<sup>3</sup>.

- Specifikace rozpouštědla: DMSO p.a. ≥ 99,9% (GC), CAS 67-68-5, kdy neobsahuje složky považované buď za perzistentní, bioakumulativní a toxické, nebo za vysoce perzistentní a vysoce bioakumulativní v koncentraci 0,1 % či vyšší.

- Dodání chemických látek, které mohou být skladovány v kontrolovaném prostředí automatizovaného skladovacího systému, který je určený k tomuto účelu. Podmínky skladování: teplota - 20 °C, dusíková atmosféra (maximální přípustná koncentrace atmosférického kyslíku je 1 %).

- Dodavatel označí zásilku názvem „Knihovna chemických sloučenin“ a zašle ji zadavateli na jeho adresu. Zadavatel neumožňuje rozdělení dodávky.

## Data pro stanovení čistoty látek

Veřejná zakázka: Knihovna chemických sloučenin  
Zadavatel: Ústav molekulární genetiky AV ČR, v. v. i., Vídeňská 1083, 142 20 Praha 4  
Kontaktní osoba: Mgr. Ing. Jana Bražinová Krejčová  
e-mail: [jana.brazinova@img.cas.cz](mailto:jana.brazinova@img.cas.cz)

Název uchazeče:

Sídlo uchazeče:

Kontaktní osoba:

Další identifikační údaje:

Zadavatel požaduje od uchazeče ruční doplnění jeho identifikačních údajů v hlavičce souboru a v tabulce ruční doplnění četnosti sloučenin pro uvedené hodnoty čistoty (sloupec „Četnost“).

Čitelné vyplnění a doložení tohoto vytištěného dokumentu „Data pro stanovení čistoty“ je nedílnou součástí nabídky uchazeče a bude sloužit jako podklad pro její hodnocení.

### Tabulka „Data pro stanovení čistoty látek“

Čistota [%]	Četnost [-]
90	
91	
92	
93	
94	
95	
96	
97	
98	
99	
100	

Zadavatel doporučuje uchazeči po vyplnění dokument podepsat a označit příslušným datem.