

Příloha č. 1

Technické podmínky

Veřejná zakázka: „Knihovna chemických sloučenin II“

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 unikátních chemických sloučenin (dále jen knihovna látek) ze zadavatelem 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), který bude označen názvem „**Knihovna chemických sloučenin II - nabídka**“, identifikačními údaji a názvem uchazeče. Uchazeč uvede u každé nabízené sloučeniny původní strukturu dle seznamu sloučenin definovaného zadavatelem. Dodavatelem uvedených 45 000 unikátních 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 ¹H-NMR.

Zadavatel uvádí šablonu tabulky „Data pro stanovení čistoty látek“ na konci tohoto dokumentu. Uchazeč 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 ≥ 10 miligramů (mg).

3. 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 její 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 dodržením 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), který bude označen názvem „Elektronická dokumentace“, názvem veřejné zakázky, názvem a identifikačními údaji dodavatele a zašle jej na adresu zadavatele.
- Po obdržení elektronické dokumentace označí zadavatel stojánky s prázdnými zkumavkami pomocí číselného kódu ve formátu „CP-XXXXXX“ a čárového kódu ve formátu Code 39. Zadavatel bude informovat dodavatele, že jsou stojánky se zkumavkami připraveny k vyzvednutí.

b) Dodavatel zajistí u zadavatele vyzvednutí prázdných a zadavatelem označených zkumavek (viz bod. 3 a), naplnění 45 000 sloučenin do zkumavek ve stojáncích a jejich dodání na adresu zadavatele do 50 kalendářních dnů od data podpisu smlouvy dle níže uvedených specifikací:

- 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/dm³.
- 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 II“ a zašle ji zadavateli na jeho adresu. Zadavatel neumožňuje rozdělení dodávky.

Data pro stanovení čistoty látek

Veřejná zakázka: Knihovna chemických sloučenin II
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

Název uchazeče:

Sídlo uchazeče:

Kontaktní osoba:

Další identifikační údaje:

Zadavatel požaduje od uchazeče doplnění jeho identifikačních údajů v hlavičce souboru a v tabulce doplnění číselného vyjádření četnosti (počtu) sloučenin pro uvedené hodnoty čistot (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.