

高分辨质谱

1、工作条件

1.1, 适于在气温为摄氏 $15^{\circ}\text{C} \sim +50^{\circ}\text{C}$ 和相对湿度小于 80% 的环境条件下运输和贮存。

1.2, 适于在电源 220V/50HZ, 45A 单相交流, 带地线, 总配电功率 10000VA, 零地电压 $< 3\text{V}$, 地线阻抗 $< 4\Omega$ 、气温摄氏 $+15^{\circ}\text{C} \sim +30^{\circ}\text{C}$ 和相对湿度 20% 到 80%, 不凝露的环境条件下运行。能够连续正常工作。

2、设备用途

该仪器主要应用于结构化学和未知化合物鉴定等相关的研究分析工作。

3、设备技术性能要求

3.1、离子源

#3.1.1 配有独立的电喷雾离子源 (ESI) 和大气压化学电离源 (APCI), 插拔式可互换 ESI 及 APCI 喷针, 可实现 ESI 源及 APCI 源 1 分钟内快速更换, 无需放空质谱真空系统, 无需插拔气路和电路, 无需借助工具, 即插即用, 自动识别。

#3.1.2 ESI 源耐受流速: 在确保灵敏度不损失的前提下, 实现高流速, 无需分流即可达到 $0.005 \sim 3.0 \text{ ml/min}$; APCI 源耐受流速: 在确保灵敏度不损失的前提下, 实现高流速, 无需分流 $0.050 \sim 3.0 \text{ ml/min}$; 兼容 100% 的有机相到 100% 的水相。

#3.1.3 离子源内有两路加热雾化气, 确保离子化充分, 辅助加热气温度最大可至 700°C 以上, 确保离子化效率和抗基质干扰能力。该最大温度可以在软件界面下设置并运行。

3.1.4 离子源抗污染: 离子源内有主动废气排放装置, 防止气体在密闭的离子源腔体中的回流, 降低离子源的记忆效应和污染, 降低机械泵的负荷延长机械泵泵油使用时间, 维护试验环境, 保障工作人员健康。

#3.2、离子引入采用锥孔技术 (或同类技术), 反吹气设计, 离子传输通道无毛细管类结构, 不易堵, 终生无需提供毛细管等耗材费用, 以同时保持长期超高的灵敏度和优异的抗污染能力。

#3.3、离子导入聚焦：采用高压碰撞聚焦技术（或同类技术），保证更多的离子进入质谱。结构为四级杆型设计，方便清洗维护。

3.4、碰撞室：

3.4.1 采用高压聚焦线性加速技术，保证 10ms 的碰撞时间无交叉污染。

#3.4.2 采用高纯氮气作为雾化气和碰撞气，无需额外氦气。

3.5、质量分析器：四极杆-飞行时间质谱仪，在一个系统上可实现高分辨的定量功能和高灵敏度的定性功能，集高扫描速度、高灵敏度和高分辨率于一体；可一次进样同时采集高分辨一级 MS 和高分辨二级 MS/MS 谱图。

3.5.1 高分辨飞行时间离子路径：采用二次反射技术，确保系统实现最佳高分辨性能，且不损失灵敏度。

3.5.2 稳定性 TOF 技术：六组加热模块确保 TOF 管离子传输准确稳定，质荷比漂移最小。

#3.6、检测器：采集频率 $\geq 40\text{GHz}$ ，提供最高取样速度并保持高分辨率，保证 $m/z < 200$ 低质量端的化合物能得到很好的分离。

3.7、自动校正流路与离子化喷针采用平行设计，使系统达到更好的准确校正，实现系统准确可靠的定量分析、定性筛查要求。系统稳定性好，无需实时校正。

3.8、性能部分：

#3.8.1 质量范围 m/z ：5~40000 或者更宽

*3.8.2 分辨率：MS 和 MS/MS 模式 ≥ 40000 （FWHM），测试条件：监测离子 m/z 956，扫描速度：80 张谱图/秒

3.8.3 质量稳定性： $< 2.0\text{ppm}/24\text{h}$

#3.8.4 质量精度：外标法 $\leq 1\text{ppm}$ ，内标法 $\leq 0.4\text{ppm}$ 。

#3.8.5 最大扫描速度：100 Hz，维持分辨率 ≥ 42000 ，且从 1Hz 升至 100Hz，不损失灵敏度和分辨率，保证一针进样同时定性定量的准确性。

3.8.6 扫描工作方式：具有 MS 全扫描、MS/MS 扫描、MS/MSALL 扫描、母离子扫描、中性丢失扫描功能、母离子扫描-IDA-MS/MS、中性丢失-IDA-MS/MS，实时多重质量亏损-IDA-MS/MS。

3.8.7 高分辨定量模式：可以进行高分辨的二级定量，a、可以简单的将三

重四极杆的定量方法转移到高分辨质谱方法上；b、同时可以给出离子对比率的信息；c、另外还具有根据样品的实际情况自动生成保留时间的可变窗口的 Schedule MRM 分段采集功能，可以对每个窗口的所有离子进行快速的扫描。

3.8.8 数据依赖扫描模式：一针进样，根据样品的实际情况，采集超过预值的离子，系统会自动的将强度前 20 位的有效离子触发，然后结合 80 张/秒谱图超快的扫描速度，采集其所有的二级碎片离子，采集到的碎片离子和母离子是一一对应的关系。系统可同时触发 100 个有效离子。其在分析类如中药、复杂基质药物等复杂的共流出物或干扰很强的样品时，可以选择特定的离子或色谱保留时间，自动动态排除干扰离子，而给出其它相对信号较弱的共流出物的离子的 MS/MS 信息。自动动态包含选择特定的离子进行 MS/MS 分析。

3.8.9 具有数据非依赖性采集和分析功能：必须具备一次进样同时定性和二级高分辨定量，根据样品的实际情况自动生成跟样品匹配的可变质量窗口，结合 80 张/秒谱图超快的扫描速度，收集每个窗口的所有一级 MS 数据和二级 MSMS 数据，a、确保采集到的碎片离子和母离子是一一对应的关系。b、并且得到二级 MSMS 数据可以进行高分辨二级定量分析，定量结果更准确，同时方便建立样品的数字档案。c、同时可以实现样品的重复解析，而不需要重复进行物理分析，省时高效同时节约大量资金和精力存储样品，保证高质量的数据结果。

3.8.10 仪器在采集过程中，具有动态背景扣除功能（采集软件可以自动判断并排除背景离子），从而尽可能多的采集背景干扰离子以外相对信号较弱的共流出物的离子的 MS/MS 信息。

3.8.11 系统定量性能部分：

3.8.11.1 动态范围 ≥ 5 个数量级，在同一张谱图上最高响应值应该大于最低响应值至少 100000 倍。

#3.8.11.2 可以实现和 LCMSMS 一样的定量结果，设置参数和 LCMSMS 模式一样进行精确的母离子以及子离子信息，而非设置离子范围，并且定量数据显示离子比例信息，一次可测 800 个化合物。

3.8.11.3 定量线性范围 > 4 个数量级

3.8.11.4 定量灵敏度：1pg 利血平，过色谱柱，信噪比 $\geq 1750:1$

3.9、超高效液相色谱部分

- 3.9.1 流速范围：0.001-2mL/min
- 3.9.2 泵类型：并联双柱塞
- 3.9.3 最大泵压力：860bar
- 3.9.4 流速精密度：<0.1% RSD
- 3.9.5 柱温箱温控范围：5~85℃
- 3.9.6 自动进样器温控范围：4-40℃
- 3.9.7 自动进样器最高耐压：860bar
- 3.9.8 进样体积：0.1ul-50ul
- 3.9.9 自动进样器位数≥96 位（1.5ml 样品瓶）
- 3.9.10 高灵敏度紫外检测器

4、产品配置要求

- 4.1 高分辨质谱仪 1 套（包括液相色谱：二元泵、柱温箱、自动进样器、脱气机、紫外检测器；质谱主机：独立的 APCI 源、ESI 源；）
- 4.2 数据处理系统（包括硬件与软件）1 套，彩色打印机 1 台
- 4.3 不间断稳压电源 1 台（10KV，2hr）
- 4.4 氮气系统（匹配质谱使用）

5、技术文件

操作说明书、《设备通信协议》、《设备接口示例》。

6、技术服务要求

6.1 设备通信接口技术附件

***6.1.1 一般说明**

设备必须满足本技术附件所述通信接口要求，并在规定时间阶段提供相应的技术文件和技术服务。合同签订后，如存在乙方设备不满足通信接口技术附件要求或乙方逾期未提供并在催促后仍拒绝提供或延提供相应的技术文件和技术服务的情况，甲方有权解除合同并退货，所产生的一切费用由乙方负责。

6.1.2 设备通信及接口说明

机器化学家平台是一个开放性的智能化实验系统，支持众多类型的实验设备接入，乙方提供的设备需要能够按甲方机器人化学家平台的协议进行通信，并向平台开放 API 接口，以实现无人参与的自动化实验过程。具体接口要求如下：

6.1.2.1 平台可以通过非界面交互的方式（见 6.1.2.5）获得设备运行状态、故障、结果等数据，并能解析相关的数据格式；

6.1.2.2 平台可以通过非界面交互的方式（见 6.1.2.5）发送控制指令（指令包含界面交互中常用操作如开启，关闭，暂停以及实验过程中所需的软件基本操作等），控制指令需为通用数据格式、相关控制参数可由指令配置；

6.1.2.3 交互的方式（见 6.1.2.5）开放的粒度和控制界面功能相对应，平台发送的控制指令以控制界面上的功能为宜，不需要调用底层的接口。

6.1.2.3 技术文件提供合同签订后的两周内，供应商应向采购人提供以下技术文件：《设备通信协议》、《设备接口示例》。

6.1.2.4 通信接口技术服务

在采购人实现供应商的仪器和设备对接自动化平台和软件系统过程中，根据采购人实际需求，供应商需要派出至少一名专业的技术工程师现场无条件对接此过程中工作，且在对接过程中产生的费用（包括但不限于出差差旅费、交通费、住宿费以及生活费）由供应商承担。

6.1.2.5 交互方式分类（符合其中一类即可）

6.1.2.5.1 常见工控协议，包括但不限于 R485, R232, EtherCAT, CAN 等。其他协议需要明确说明

6.1.2.5.2 常见网络协议，包括但不限于 TCP/IP, UDP, HTTP, MQTT 等。其他协议需要明确说明

6.1.2.5.3 命令行方式（包括但不限于 Windows 系统下批处理文件，Shell 脚本等方式）调用程序功能。

6.1.2.5.4 函数库形式（包括但不限于 dll 动态库，开源代码等），调用程序功能。

6.1.2.5.5 开发者工具包（SDK），仪器 SDK，直接面向仪器的底层驱动。API 函数接口形式，仪器嵌入式系统的指令集，命令行，或者通讯协议。字符串形式，

仪器自带软件的软件通讯，脚本编写，命令行控制模式等。提供二次开发环境，厂家工程师现场无条件对接此过程中工作直至项目顺利运行为止。

6.2 质量保修期：提供至少整机 1 年的免费保修，保修期自仪器验收签字之日算起。

6.3 维修响应时间：卖方在接到通知后 24 小时内响应；常规问题在 48 小时内解决；较大问题应在 3 天内解决或提出明确的解决方案，经用户认可后，在预定期限内解决问题，否则，厂家应赔偿由此造成的损失

6.4 技术培训：在仪器安装完成后，对使用人员免费进行技术培训，包括仪器的基本原理和基本结构、仪器的操作方法、用户实验人员硬件、使用时的注意事项、仪器的基本保养维护程序，及用途培训等直至可以独立操作为止。（提供**技术培训方案**）

7、订货数量

1 套。

8、项目现场：

中国科学技术大学指定地点

9、交货日期：

合同生效后 2 个月内。