

技术参数

超高效液相色谱-四极杆飞行时间质谱联用仪

技术参数

1、应用范围：

用于环境样品中环境污染物的分析，药物结构及药物代谢物鉴定，食品中极性农药及兽药残留的发现鉴定，法医毒理学中痕量和超痕量毒物的筛查确诊和定量分析，以及蛋白质组学和代谢组学研究，用于纺织品中已知违禁成分和未知成分的快速筛查确诊和定量分析。

2、工作条件：

2.1、工作电压：220±5%V；

2.2、操作温度：15-30℃；

2.3、湿度：<85 %；

3、系统要求：

3.1、制造商生产超高效液相色谱-四级杆串联飞行时间质谱仪经验达5年以上。

*3.2、为确保仪器系统的整体性，要求以下各模块为同一厂家提供，且售后服务中的培训、维修等服务均由同一厂家工程师进行。

4、技术参数

4.1、液相色谱部分

4.1.1、高压混合二元梯度泵

*4.1.1.1、流量范围：0.001 mL/min~4.0 mL/min，递增率 0.001 mL/min。

4.1.1.2、流量精度：≤0.072% RSD。

*4.1.1.3、压力范围：18,000psi 或更高。

4.1.1.4、混合精度：< 0.20% RSD。

4.1.1.5、延迟体积最小可达 45μL。

*4.1.1.6、耐受 pH 范围：2-12.5。

4.1.2、二元高压梯度制备泵

*4.1.2.1、串联式双柱塞往复泵，自动连续可变冲程设计（20-100μl），主动电磁阀控制，自主溶剂压缩因子设置；

4.1.2.2、梯度形成：两个泵高压混合；

4.1.2.3、流速范围：0.001~50.000mL/min，以0.001递增；

*4.1.2.4、流速精度：<0.3%RSD；

*4.1.2.5、最大耐受压力：420bar；

4.1.2.6、pH范围：1.0~12.5 Ti合金泵头；

4.1.2.7、推荐梯度范围：5 - 95%；

4.1.2.8、流速准度：< ±1 %；

*4.1.2.9、组成准度：< ±1 %，从5-95%；

4.1.2.10、流速精密度：<0.3 % RSD；

4.1.2.11、组成精密度：<0.3 % RSD；

4.1.3、自动进样器

*4.1.3.1、自动进样器可进行编程进样，用于柱前样品自动稀释，自动混合等复杂进样方式。

4.1.3.2、样品容量：>130位2mL样品瓶。

4.1.3.3、进样范围：0.1~20μL，步进0.1μL。

4.1.3.4、进样精度：<0.25% RSD。

4.1.3.5、交叉污染度：<0.004%（以氯己定为测试对象）。

4.1.4、制备自动进样器

4.1.4.1、自动进样器采用高压、阀进样技术，进样速度快，且进样系统中残留小；

*4.1.4.2、可进行编程进样，用于进行柱前衍生，柱前样品自动稀释，自动混合等复杂进样方式。此外，用户可根据样品的粘度，调节取样及进样速度。

4.1.4.3、自动进样器均采用深色避光盖板，便于光敏感样品的长时间放置；同时进样器内安装有照明装置，便于用户操作。

4.1.4.4、进样范围：0.1~900μL；

4.1.4.5、进样精密度：<0.5% RSD；

4.1.4.6、进样循环时间：50s；

4.1.4.7、样品容量：132 × 2 ml样品瓶；

4.1.4.8、样品残留：<0.05%（启动洗针程序）；

4.1.4.9、最高操作压力400bar；

4.1.5、智能化温控柱箱

4.1.5.1、控温范围：可加热至 70℃ 以上。

4.1.5.2、柱容量：可容纳 2 根长度 25cm 以上的色谱柱。

4.1.5.3、具有色谱柱识别模块，可用于记录色谱柱类型、使用次数等信息。

4.1.6、二极管阵列检测器

*4.1.6.1、检测器类型：1024 个二极管元件；

4.1.6.2、光源：氙灯；

4.1.6.3、最大采样速率：120Hz；

4.1.6.4、短期噪音：在 230/4 nm 处， $< \pm 3 \times 10^{-6}$ AU；

4.1.6.5、漂移：在 230 nm 处， $< 0.5 \times 10^{-3}$ AU/h；

4.1.6.6、线性：在 265 nm 处， > 2.0 AU；

4.1.6.7、波长范围：190 - 640 nm；

4.1.6.8、波长准确度： ± 1 nm，采用氙灯进行自动校准；

*4.1.6.9、波长精度： $< \pm 0.1$ nm；

4.1.6.10、GLP 特性：数据恢复卡，防止数据丢失。RFID 用于电子记录流通池和 UV 灯的状况；早期维护反馈 (EMF) 连续记录仪器的使用情况，如灯的使用时间和用户设定期限，并提供反馈信息。

4.1.7、可变波长紫外检测器

*4.1.7.1、可变波长范围：190~600nm；

4.1.7.2、光源：氙灯；

4.1.7.3、波长准确度： ± 1 nm；

4.1.7.4、线性范围： > 2.5 AU；

4.1.7.5、基线噪音： $< 2.5 \times 10^{-6}$ AU；

4.1.7.6、漂移： 1×10^{-4} AU/hour；

4.1.7.7、信号输出：2 个输出；

4.1.7.8、流通池：3mm，可耐压 120bar；

*4.1.7.9、数据采集速率：100Hz 以上；

4.1.8、馏分收集器

*4.1.8.1、专利延迟校准传感器，自动测算峰检测与收集之间的时间差，准确开启收集阀门；

4.1.8.2、流分收集的触发模式：时间段收集，峰收集，时间表收集，手动收集；

4.1.8.3、流分收集模式：

4.1.8.3.1、不连续收集：适合所有收集容器，在两个收集容器之间，液流被导向废液；

4.1.8.3.2、针插入式收集：对于样品瓶、试管或酶标板，针可插入到一定深度进行收集；

4.1.8.4、操作流速：0~100mL/min；

4.1.8.5、容器及其容量：所有样品容器及其容量，仪器均自动识别，并自动计算实际载样量；

4.1.8.6、安全性能：泄漏检测和安全处理、错误检测和显示、具有用于排放有害蒸气的排气扇；

4.1.8.7、位数：215×7mL；

4.1.8.8、安全性能：漏液报警，强制排风，故障检测并提示；

4.2、四极杆串联飞行时间质谱部分

4.2.1、离子源和进样系统

4.2.1.1、独立双喷雾口设计：采用待测样品和参比标样分两个喷雾针分别电离的方式，使待测样品与参比标样分别独立离子化，参比液不干扰样品的离子化，无竞争抑制。且校正过程中不会因为参比标样和待测样品之间的切换而导致数据点丢失。

*4.2.1.2、正交喷雾口设计：即喷雾针与质谱入口垂直，既保证离子采样速率，又能提高抗污染能力。能够适应不同的 HPLC 流速，耐盐溶液，抗污染。

4.2.1.3、离子源清洗简便，无需拆卸任何部件，更换无需任何工具。

4.2.2、四极杆质量分析器：采用双曲面金属四极杆，并可控温至 90 度以上，以提高仪器的抗污染能力和质谱参数的稳定性。

*4.2.3、为避免在四极杆维护过程中发生意外损坏，要求提供备用原厂四极杆一套或四极杆加热智清洁单元一套（加热智清洁单元需软件截图作为证明）。

4.2.4、可采用高纯氮气作为碰撞气，无需氩气。

4.2.5、飞行管：采用反射式飞行路径设计，保证分析灵敏度。采用温度惰性合金和真空隔热夹层设计，保证常规实验室环境下的使用。

4.2.6、离子加速动态温度监控技术：离子加速装置具有动态温度监测技术，保证所有离子加速能量恒定，以保证最佳质量准确度。

*4.2.7、检测器：高性能长寿命光电倍增管检测器，为消除死时间效应，提高定量性能，要求采用模拟数字转换（ADC）模式。

4.2.8、真空系统：大抽速机械泵和长寿命涡轮分子泵组合差分抽气高真空系统。

4.2.9、检测性能：

4.2.9.1、分辨率： $>45000\text{FWHM}@m/z\ 922$ ；

4.2.9.2、质量准确度：优于 0.8 ppm；

4.2.9.3、灵敏度：柱上 1pg 利血平， $S/N>1000:1$ ，满足同时定性定量分析要求。

*4.2.9.4、正负离子切换时间： $< 2\text{sec}$ （需提供软件截图）

*4.2.9.5、质量范围：四极杆 $m/z\ 100-4000$ ，TOF 质量范围 $m/z\ 100-10000$

*4.2.9.6、采样速度： $\geq 45\ \text{spectra/s}$ （需提供软件截图）

4.2.9.7、长期运行稳定性：室温变化 ± 10 度，湿度 10~90%条件下，仪器运行质量误差 $< \pm 1\text{ppm}$ 。

4.2.9.8、全息二级质谱技术：一针进样，一次扫描就能获得样品中每个化合物全面的 MS 和多碰撞能量下 MS/MS 信息，简化进样分析流程，提高分析效率。且分析过程中无需通过四极杆进行质量分段。

4.3、工作站软件

*4.3.1、仪器控制软件：所有液相单元和质谱由同一软件控制。可以实现数据采集，数据分析，液相和质谱同步控制，在线监测，反馈显示和序列采集。

4.3.2、全自动调谐软件：一键触发式的全自动调谐系统，内置调谐液，无蠕动泵手动操作步骤。

4.4、数据分析软件

4.4.1、分子特征提取软件：从海量数据提取化合物特征信息，能够消除背景噪音干扰，从背景中提取响应很小的组分信息，确保不会漏掉任何可能存在的目标组分信息。

4.4.2、分子式计算软件：通过精确质量、同位素丰度比、同位素精确质量差等

三维信息可靠关联分析，给出最终结构信息。（提供三维信息计算的软件截图）

4.4.3、定量分析软件：自动进行定量分析，可设置自动处理流程，在打开数据完成数据处理和报告生成工作。

4.4.4、MS/MS 质谱结构解析软件：根据 MS 一级分子式及 MS/MS 二级碎片谱图信息，自动进行碎片信息关联解析，给出结构式信息。

4.4.5、数据分析软件可提供中文版本。（需提供软件截图）

5、售后服务

5.1、仪器在调试通过后提供 1 年保修服务，在保修期内，所有服务及配件全部免费（消耗品除外）。

5.2、仪器厂商在接到最终用户报修通知的 8 小时内应答，48 小时内工程师上门服务；

5.3、仪器厂商应在现场免费进行安装调试该系统，确保仪器技术指标验收合格；并负责在现场或培训基地培训买方的技术人员、操作和维护人员。

5.4、仪器厂商在中国境内提供培训中心，免费培训用户的操作技术人员(贰人次/五天/壹台)。

5.5、全国免费服务热线，7*8 小时在线服务，指导操作，诊断故障，排除故障。

***5.6、维修工程师响应迅速，河南省有常驻售后服务工程师，并提供联系人姓名电话。**

5.7、在国内有保税仓库，保证零配件供应及时。

6、配置：超高压液相色谱系统包括：超高压混合二元梯度泵（含真空在线脱气机，柱塞清洗附件，连接毛细管，溶剂瓶，液相工具包等），自动进样器，柱温箱，二极管检测器，紫外检测器，1 套；高分辨质谱系统：包括独立的 ESI 离子源，独立的 APCI 源，四极杆串联飞行时间质谱主机，机械泵，内置调谐液传输系统，内置切换阀，质谱工作站；挥发性有机小分子成份分析单元 1 套；计算机（Intel 四核 CPU，16GB 内存，2×500GB 硬盘，独立显卡，DVD/CD-RW，Microsoft Windows 操作系统，24 英寸液晶显示器），黑白激光打印机等 1 套；C18 2.1x50mm，粒径< 2um 色谱柱 2 根；C18 2.1x100mm，粒径 3.5um 色谱柱 2 根；C18 3.0 x50mm，粒径< 2um 色谱柱 2 根；C18 4.6x250mm，粒径 5.0um 色谱柱 6 根；2mL 样品瓶（含瓶、盖和垫）500 个；机械泵泵油 3L；在线过滤器 3 个；在线过滤器滤芯 30 个；调谐液 200mL；手拧接头 10 个；进口氮气发生器（气量满足质谱工作要

求) 1套; 连接管线 1套; UPS 电源 (10KVA, 延时 1 小时) 1套; 氮气钢瓶及减压阀 1套; 冷冻干燥机 1台; 实时校正内标溶液 (大分子和小分子) 各 1瓶; UPS 电源 (10KVA, 延时 1h) 1套; 质谱毛细管 1套; 喷雾针 2套; 备用原厂四极杆一套或四极杆加热智清洁单元一套; 二元高压梯度制备泵 1套; 系统工具包 1套; 制备型自动进样器 1套; 多次进样组件 1套; 柱支架 1套; 泄压阀 1套; 化学工作站中文软件 1套; 常用农药、真菌毒素、兽药化合物、激素类等数据库 1套; 万分之一电子天平, 千分之一电子天平, 各 1台; 6mL 样品瓶 200个; 样品瓶瓶盖 200个; 样品瓶盖垫 200个; 馏分收集盘 25*100mm 1套; 馏分收集管 25*100mm 200个; 毛细管线工具包 1套; 21.2*250mm C18 10um 1根; 21.2mm 柱卡套 1个; C18 250 x 10.0mm 2根; 管线切割器及可更换刀片 1个; 糖基柱 2.1x250mm, 粒径 < 5um 色谱柱 1根; 氨基柱 2.1x250mm, 粒径 < 5um 色谱柱 1根; 保护柱套 1套; 保护柱芯 4包; 10um C18 250 x 30.0mm, 1根; 过滤白头 10个; 流动相: 甲醇 20L, 乙腈 20L; 电脑 (I5 处理器或以上, 8G 内存或以上, 500G 硬盘或以上, 21.5 英寸液晶显示屏或以上, Windows 系统) 1套; 黑白激光打印机 1套; 抽风系统 1套; 粘度计 1个。