

1. 用途

主要用于建立粮食中主要和新兴污染物高分辨质谱数据库（包含 CCS 值）；开展粮食中主要污染物的潜在、未知代谢物的识别和鉴定；开展粮食中主要和新兴污染物污染状况、代谢机理和毒理效应研究；开展新兴污染物多特性量标准物质研制，提升新兴污染物检测结果的准确性和溯源性。

2. 工作条件

2.1 工作电压：220±10%V，50Hz；

2.2 温度：16.0-28.0℃；

2.3 湿度：20%-80%，无冷凝；

3. 技术指标

1) 离子淌度高分辨质谱仪指标

1.1 主要性能指标

1.1.1 高分辨质谱质量范围 (m/z): 50-40000 或更宽，提供质量范围设置的软件截图证明文件，并加盖制造商公章。

1.1.2 仪器分辨率： $\geq 100,000$ FWHM (测定牛胰胰岛素 (M+6H) 6+ 的 m/z 956)，且分辨率不受采样速率影响，提供 m/z 956 在采样速率分别为 5、10、20、30、40 分辨率不小于 100000 测试数据作为证明文件并加盖制造商公章。

1.1.3 质量精确度（外标法）：MS 模式下 $< 1.0\text{ppm}$ ；MS/MS 模式下 $< 1.0\text{ppm}$ 。

1.1.4 灵敏度（MS 模式）：1pg 柱上样量利血平，原始数据不经过平滑处理，信噪比 $S/N \geq 4000:1$ 。

1.1.5 采样速率：每秒 ≥ 45 张谱图（45 Hz），提供采集速率不低于 45Hz 设置的软件截图证明文件，并加盖制造商公章。

1.1.6 以伏马菌素 B2 和伏马菌素 B3 为分析物，质谱端无需经过液相色谱分离直接进样，得到 m/z 706.40，两者的碰撞截面积(Ω)分别为 258.5 和 259.0Å，可以得到很好的分离， $\Omega/\Delta\Omega\geq 10$ ，提供伏马菌素 B2 和伏马菌素 B3 漂移时间测试数据证明文件，保证 $\Omega/\Delta\Omega\geq 10$ ，并加盖制造商公章。

1.1.7 可实现 ≥ 5 级离子碎片的采集。

1.1.8 无需标准品预先优化仪器参数，即可实现 ≥ 3 级离子碎片的分离，能够直接获得获得 MS 及 MS/MS 淌度分离能力。

1.1.9 动态范围：在 MS 模式下， ≥ 5 个数量级。

1.1.10 可实现淌度前的质量数选择，离子淌度分辨率 ≥ 350 。

1.2 质谱硬件部分

1.2.1 需配同时具有电喷雾电离(ESI)和大气压化学电离(APCI)的复合离子源或独立 ESI 和 APCI 离子源。

1.2.2 离子源和质谱之间有隔断阀，待机时和清洗离子源接口（锥孔或毛细管）时均可真空隔断，无需将质谱卸真空。

1.2.3 待机状态下 (Standby)，离子源不消耗氮气，软件设置界面氮气流速设置 $\leq 0.1\text{L}/\text{min}$ 。

1.2.4 离子源接口采用锥孔设计或毛细管设计（包括但不限于毛细管、离子传输管、加热传输管等），若为锥孔设计，额外配置 ≥ 1 个锥孔；若为毛细管设计，需额外配置 ≥ 5 根毛细管。

1.2.5 离子源具有双控温区域，脱溶剂气温度： $\geq 600^\circ\text{C}$ ，离子源接口温度： $\geq 120^\circ\text{C}$ 。提供脱溶剂气温度和离子源接口温度分别设置为至少 600°C 和 120°C 的软件截图证明文件，并加盖制造商公章。

1.2.6 内置全自动注射泵并自带 ≥ 3 路进样瓶，实现质谱的自动调谐和校正，而且可直接进样分析，提供高分辨质谱端用于自动调谐和校正的至少 3 路进样瓶的仪器图片证明文件，并加盖制造商公章。

1.2.7 样品测试和质量校正进样口数量： ≥ 2 ，样品谱图与校正试剂谱图采集通道合计： ≥ 2 ，软件能够自动根据同一样品数据中校正试剂的质量信息对样品数据进行校正。

1.2.8 提供 CCS(碰撞横截面积)作为辅助定性手段,且 CCS 值稳定性 $\leq 0.2\%$ 。

1.2.9 检测器：复合式 ADC 检测器系统或无损检测器。

1.2.10 前级真空系统：采用免维护静音无油机械泵，噪音 ≤ 60 dB (A)。

1.3 离子淌度高分辨质谱仪硬件扩展性

1.3.1 离子源具有可扩展性，可扩展的离子源数量： ≥ 5 种，满足不同样品基质中各种化合物的分析需求；要求可连接质谱成像电离源，可用于谷物中真菌毒素质谱成像空间分布研究，且由同一软件控制。

1.3.2 分离端具有扩展性，扩展分离端数量： ≥ 3 种，满足挥发性和非挥发性化合物的分析需求；要求可扩展超临界流体色谱仪，对植物油脂中的甘油三酯同分异构体进行分析。

1.4 质谱软件部分

1.4.1 可通过软件自动化控制质谱数据采集类型： ≥ 4 种（包含但不限于 MS 模式，MSMS 模式，离子淌度模式，多级碎裂模式等）。

1.4.2 组学数据处理软件可支持主流高分辨质谱的 LC-MS 数据分析： ≥ 3 个，同时也支持通用格式： ≥ 3 种（包含但不限于 .mzML、.mzXML 和 NetCDF），提供软件兼容不同厂家数据的官网截图证明文件，并加盖制造商公章。

2) 超高效液相色谱仪指标

2.1 系统管路采用金属不敏感高性能表面技术，可实现系统不经过高浓度硝酸和磷酸等措施钝化（流动相仅为甲酸水或水/乙腈，流动相不添加 EDTA 或柠檬酸等预处理试剂）开机直接测试，液相系统直接进样浓度为 2000 $\mu\text{g}/\text{kg}$ 伏马菌素 B2,对色谱系统不做清洗，直接连续进 6 针空白溶剂，从第 2 针空白溶剂起，伏马毒素 B2 的信噪比 ≤ 10 ，提供上述实验第 2 针到第 6 针空白溶剂伏马毒素 B2 的信噪比 ≤ 10 的测试数据证明文件，并加盖制造商公章。

2.2 二元溶剂管理系统

2.2.1 最大操作压力： $\geq 15,000\text{psi}$

2.2.2 色谱泵驱动马达数量： ≥ 4 ；色谱泵压力传感器数量： ≥ 4 。

2.2.3 在线真空脱气机通道数量： ≥ 5 ，且至少有 1 个通道为自动进样器清洗液脱气。

2.2.4 流速范围：0.010-2.000 mL/min ，以 0.001 mL/min 为增量。

2.2.5 梯度曲线模式： ≥ 10 种（包含但不限于步进、凹线、凸线、直线），提供梯度曲线的软件截图证明文件，并加盖制造商公章。

2.3 自动进样器管理系统

2.3.1 容纳样品数量： ≥ 90 个（2 mL 样品瓶）

2.3.2 进样精度： $\leq 0.3\%\text{RSD}$

2.3.3 样品交叉污染度： $\leq 0.002\%$

2.3.4 样品室温度范围： 4°C - 40°C ，可编程，增量： 1°C

2.4 柱温箱

2.4.1 温度范围： 4°C - 65°C ，增量： 0.1°C

2.4.2 同时可放置 ≥ 4 根色谱柱,具备柱切换功能,能够自动切换色谱柱使用。

2.4.3 色谱柱信息跟踪记录:在线记录色谱柱使用信息,并随色谱柱独立保存。

3) 氮气发生器指标

3.1 最大流速: $\geq 35\text{L/min}$

3.2 体积: 宽 600 深 750 高 650mm ($\pm 50\text{mm}$)

3.3 运行噪音: $\leq 60\text{ dB (A)}$

4) UPS 电源

4.1 额定功率: $\geq 10000\text{VA}$, 断电可持续供电 ≥ 2 小时

4.2 电池使用寿命: ≥ 3 年

5) 工作站硬件要求:

不低于:单核主频 4.0GHz 4 核心 8 线程的 CPU, 64 GB RAM 2600MHz DDR4,
配置 10TB 7200RPM 硬盘和 512G SSD 固态硬盘。

4. 配置清单

1) 离子淌度高分辨质谱仪主机 1 套, 包含:

1.1 ESI 和 APCI 复合离子源或独立的 ESI 和 APCI 离子源 1 套;

1.2 锥孔 2 个或毛细管 5 根

1.3 全自动注射泵 1 套

1.4 流路切换阀 ≥ 1 套 (供应商提供 5 年免费更换承诺函, 加盖制造商公章)

1.5 四极杆 1 套

1.6 离子淌度池 1 套

1.7 飞行时间管 1 套

1.8 检测器 1 套 (含复合式 ADC 检测器系统或无损检测器 1 套)

1.9 分子涡轮泵 1 套

1.10 免维护静音无油机械泵 1 套

2) 惰性超高效液相色谱仪主机 1 套, 包含:

2.1 二元溶剂管理系统 1 套

2.2 自动进样器管理系统 ≥ 1 套(供应商提供 5 年免费更换六通阀承诺函, 加盖制造商公章)

2.3 带柱切换功能的柱温箱 1 套

3) 氮气发生器 1 套

4) 仪器控制及数据采集系统 1 套

5) 化合物分子结构鉴定软件 1 套

6) 组学数据处理软件 1 套

7) UPS 电源 1 套

8) 耗材 1 套(包含但不限于色谱柱 1 根(C18,10 mm2.1m, 1.6-1.7 μ m), 2mL 去活化样品瓶 200 个, ESI 喷针 2 根等)

9) 数据采集及分析用工作站 2 套

二、技术服务部分

5. 技术服务

5.1 安装、调试及培训

5.1.1 在货物到达使用现场后, 卖方按买方通知时间派技术人员到买方的项目现场, 在买方技术人员在场的情况下开箱清点货物, 组织安装、调试, 直至设备正常运行, 并承担因此发生的一切费用;

5.1.2 卖方负责对买方技术人员、操作人员进行现场免费培训, 培训内容包括设备操作、设备维护及简单的设备维修等, 直至技术人员、操作人员能够熟练掌握为止;

5.2 验收及验收标准

5.2.1 买方提供验收标准, 卖方参照验收标准配合买方共同验收;

5.2.2 设备验收合格后，出具验收报告，买卖双方验收文件上签字生效；

5.3 维修及技术服务

5.3.1 自验收合格签字之日起，设备整机（不包含耗材）质保期至少 3 年，终身维修。在质保期内出现确因产品质量原因而发生的质量问题由供货方免费负责维修和更换。若非产品质量原因而发生的故障，供货方须协助使用方进行维修；

5.3.2 接到用户故障检修通知后 24 小时内予以回复，无法解决的由供方 72 小时内派技术人员到现场维修。