

# 山东农业大学大型仪器设备购置论证报告

申请单位名称: 园艺学院王子院

仪器设备名称: 气相色谱质谱联用仪

联 系 人: 王子院

联 系 方 式: 1760001555

2023 年 10 月 10 日

设备名称 (进口设备要有中英文名称)	气相色谱质谱联用仪 (Gas Chromatography-Mass Spectrometer)	采购数量	1
单价 (人民币)	85 万	总价 (人民币)	85 万
经费来源	“冲一流”建设经费	采购方式	公开招标
设备基本情况			
<p>1.设备功能、技术参数、配置要求及应用等</p> <p>一、具体用途：农药残留、有机污染物及其它物质的痕量的定性和定量分析；</p> <p>二、技术规格和性能要求</p> <p>1. 工作条件</p> <p>1.1. 电源：220V，50Hz</p> <p>1.2. 温度：操作环境 20℃-35℃</p> <p>1.3. 湿度：操作状态 25-50%，非操作状态 20-80%</p> <p>2. 性能指标</p> <p>2.1. 气相色谱仪</p> <p>2.1.1. 气相色谱性能</p> <p>2.1.1.1 气相和质谱必须是同一品牌</p> <p>2.1.1.2 保留时间重复性 &lt;0.008% 或 &lt;0.0008 分钟</p> <p>2.1.1.3 峰面积重现性 《0.5% RSD</p> <p>2.1.1.4 触摸屏用户界面：采用包含玻璃界面/覆盖层的电容式触摸屏技术，分辨率《800 × 480 像素的 7 英寸屏幕，无需手写笔来执行触摸屏功能，且任何时候都不需要校准</p> <p>2.1.1.5 浏览器用户界面：具有浏览器用户界面功能，可通过手机，平板电脑，台式电脑等各种设备直接连接气相主机，以实现连接以从网络中的任何位置检查状态或运行诊断、自引导诊断和维护、远程方法和序列编辑、远程日志访问等功能，提供手机控制联机截屏的证明文件</p> <p>2.1.1.6 气相色谱性能监测：可监测的内容包括空白评估，能够在内部评估 GC 空白运行数据文件的峰面积、峰高基线噪音以及检测器的信号强度</p> <p>2.1.1.7 早期维护反馈 (EMF):《45 个计数器，以用于跟踪各种进样口、检测器和自动进样器参数以及消耗品的使用情况</p> <p>2.1.1.8 具有不低于 3 个色谱柱智能钥匙接口，可记录色谱柱使用情况，反馈色谱柱使用信息，满足数据完整性需求，需提供主机实物截图</p> <p>2.1.1.9 气相主机操作系统包含四种以上不同操作语言，适合不同客户需求，需提供语言选择界面照片</p> <p>2.1.2. 柱温箱</p> <p>2.1.2.1 柱温箱温度：室温上 5℃-450℃，20 梯度/21 平台程序升温</p> <p>2.1.2.2 升温速率：最大升温速度 120℃/min，以 0.01℃/min 增加</p> <p>2.1.2.3 降温速率：从 450℃降至 50℃&lt;3.5min</p> <p>2.1.2.4 控温准确性：0.01℃</p> <p>2.1.2.5 温度稳定性：&lt;0.01℃/1℃ 环境变化</p> <p>2.1.3. 分流不分流进样口</p> <p>2.1.3.1 最大压力设定范围：0-100 psi</p>			

- 2.1.3.2 压力设定精度: 0.001 psi
- 2.1.3.3 流量设定范围: 0-1250mL/min
- 2.1.3.4 分流比: 12500: 1
- 2.1.3.5 扳转式进样口密封系统, 无需工具能够在 30 秒内快速、轻松地更换进样口衬管
- 2.2. 液体自动进样器
- 2.2.1. 液体进样量范围: 通常介于 0.1-50  $\mu\text{L}$  之间
- 2.2.2. 样品瓶位数:  $\geq 162$  位
- 2.2.3. 进样速度: 3 种模式: 高速/低速/自定义速度, 吸取样品深度可调
- 2.2.4. 面积重现性: 小于 0.3% RSD
- 2.2.5. 交叉污染:  $< 10^{-5}$
- 2.2.6. 自动进样器可选择加热、制冷/制冷功能、震荡、标签自动识别、配置标曲、衍生化等功能, 需提供所投对应产品功能说明。
- 2.3. 质谱部分
- 2.3.1. 仪器检测限指标 (验收指标) 及灵敏度: IDL:  $\leq 10\text{ fg}$ , 100fg OFN 连续 8 次进样, 99% 置信水平下分析计算而得, 所有测试中使用的色谱柱规格必须为  $30\text{ m} \times 0.25\text{ mm}, 0.25\text{ }\mu\text{m}$ 。
- 2.3.2. 信噪比:  $1\text{ }\mu\text{L } 1\text{ pg}/\text{ }\mu\text{L}$  八氟萘针对标称质量数为 272.0 u 的离子在 50 - 300 u 范围内扫描, 信噪比大于 5000:1, 所有测试中使用的色谱柱规格必须为  $30\text{ m} \times 0.25\text{ mm}, 0.25\text{ }\mu\text{m}$ 。
- 2.3.3. 离子源: 配置 EI 源, 独立控温, 最高温度可到  $350^{\circ}\text{C}$
- 2.3.4. 可升级到全新的氢气惰性离子源 HydroInert, 针对氢气作载气的应用进行了优化, 不仅可以大幅减少因氢气短缺而造成的中断, 还可以改善使用氢气运行时的谱图保真度、峰形和灵敏度。
- 2.3.5. 最大离子化能量: 241.5eV, 提供软件截图证明, 如不能达到, 需配置两套离子源
- 2.3.6. 无损双灯丝设计, 灯丝受长效保护, 提高灯丝寿命, 灯丝电流: 0-315uA
- 2.3.7. 必须配置智清洁离子源装置, 无需卸真空, 不需拆卸离子源即可完成离子源清洁, 提供官方彩页说明, 未提供智清洁离子源装置需配置三套 EI 离子源。
- 2.3.8. 气质接口温度: 独立控温, 最高温度可到  $350^{\circ}\text{C}$
- 2.3.9. 四极杆质量分析器: 石英镀金共轭双曲面四极杆, 独立温控, 最高可达  $200^{\circ}\text{C}$ , 非预四极杆加热, 提供官方参数及软件控制四极杆温度截图证明
- 2.3.10. 离子源具备智清洁功能, 实现在线清洁和离线清洁两种模式选择, 提供质谱持久的高灵敏度性能, 以减少手工的离子源清洗维护工作, 提升实验室工作效率, 提供官方中彩页证明
- 2.3.11. 质量数范围: 0.6-1091u
- 2.3.12. 质量准确度: OFN 单同位素出现在  $m/z\ 271.987 \pm 0.005$  处, 提供谱图证明
- 2.3.13. 谱图准确度:  $\geq 99.0\%$ , 提供谱图证明
- 2.3.14. 质量稳定性: 优于  $0.10\text{ u}/48\text{ 小时}$
- 2.3.15. 扫描速率: 最高 20000 u/s
- 2.3.16. 扫描功能: 全扫描(Full Scan)、选择离子扫描模式(SIM)、全扫描和选择离子同时扫描(SIM/SCAN)、轮廓图扫描(Profile), 提供软件截图证明
- 2.4. 数据处理系统
- 2.4.1. 软件: 气质串接软件应该同时包含中文和英文两种软件, 需提供中文界面截屏证明文件
- 2.4.2. 智能预警软件和早期维护提醒: NEW Smart Alerts 智能预警软件监控仪器运行状况并提供基于电子邮件的警报; Early Maintenance Feedback 早期维护提醒功能, 监控仪器运行状况, 提醒更换关键耗材。
- 2.4.3. 通用谱库: NIST20 谱库和化学结构式库 (不少于 32 万张)
- 2.4.4. 需提供单独的脂肪酸甲酯库(37 种)、挥发性有机化合物库(66 种)、香精香料库(419 种)、

毒物库(277 种)

2.5. ACT 标识: 参与 My Green Lab 独立审核, 仪器具备 ACT 认证, 具备绿色实验室标识, 实现实验室效率、生产力和可持续性的相互联系, 助力实验室可持续发展目标, 以应对碳中和的节能化实验室变化要求, 需提供 ACT 认证资质证明

### 3 售后服务

3.1 厂家售后服务通过 ISO 质量体系认证, 需提供证书

3.2 供应商提供仪器的现场安装调试并达到投标书指标要求的技术性能, 并同时在现场对用户进行操作培训。如果现场安装测试指标未通过, 用户有权要求退货并要求赔偿损失。仪器保修期自验收合格日期起为 12 个月

3.3 仪器在调试通过后提供保修服务, 在保修期内, 所有服务及配件全部免费。供应商在中国需设有保税库, 能更及时地为用户提供备品备件。

3.4 供应商在北京、上海、广州、成都、青岛 5 个城市都必须设有分析仪器教育培训中心和应用实验室, 为用户提供仪器的基本原理、操作、日常维护及基础分析仪器理论课程, 并为用户提供上机培训, 并提供培训中心地址和照片

3.5 厂商在国内应设有专业的维修站, 具备非常完善的售后服务体系, 具备培训中心和厂家应用实验室, 有专职的维修工程师及应用工程师有效保证售后维修的及时、快捷, 并负责提供技术支持, 保证仪器的正常操作, 并协助用户进行方法开发。

### 2.同类设备市场情况简介(原则上提供三个及以上品牌、价格、市场占用率等)

3 个厂商可提供的仪器设备的性能价格比较(先进性和适用性)

	Agilent	Thermo	SHIMADZU
	8890-5977C	ISQ 7610	GCMS QP-2020
<b>GC 部分</b>			
<b>多模式进样口</b>			
多模式进样口最高温	450 °C	450 °C	450 °C
多模式进样口升温程序	10 阶	3 阶	7 阶
多模式进样口最快升温速率	900°C/min	870°C/min	250°C/min
多模式进样口最低温度	-160°C (液氮), -70°C (液态二氧化碳),	-100°C (液氮), -50°C (液态二氧化碳),	NO
<b>分流不分流进样口</b>			
分流不分流进样口压力范围	0-150 psi	0-145psi	0-140 psi
高惰性处理	有	无	无
其它技术	扳转式进样口, 无需扳手更换衬管。 手拧式柱螺帽, 无需扳手安装色谱柱。 专利镀金分流平板, 高惰性减少吸附。 微板流路技术可提供反吹、检测器分流等多种不同功	Instant Inlet, Instant Detector, 可即插即用	无特别技术

	能。		
<b>柱箱:</b>			
柱箱加热 (最大升温速率) :	120°C/min	125°C/min	250°C/min
柱箱降温速率:	< 3.5min (450°C 至 50°C)	< 4min (450°C 至 50°C)	< 3.5min (450°C 至 50°C)
柱箱温度操作范围:	室温以上 4°C~450°C	~450°C	~450°C
室温变化敏感度:	0.01°C / 1°C 室温变化	0.01°C / 1°C 室温变化	0.01°C / 1°C 室温变化
升温阶数 / 平台数:	20 阶 / 21 平台	32 阶 / 33 平台	21 阶 / 22 平台
<b>气路控制:</b>			
电子气路控制:	标准	标准	标准
电子气路控制模块数量:	6 (16 通道)	18 通道	Not given
气路控制的温度和压力补偿:	标准	标准	Not given
压力设定精度:	0.001 psi	0.01 kpa -0.001psi	Not given
<b>反吹功能</b>	软件硬件技术成熟, 专利微板流路技术简化流路连接, 死体积小, 不会影响柱效, 且可在工作站软件中直接设置相关反吹参数。	可以实现, 但采用金属三通连接, 连接较为复杂, 死体积较大, 会影响色谱性能, 软件无反吹参数设置支持。	可以实现, 但采用金属三通连接, 连接较为复杂, 死体积较大, 会影响色谱性能。反吹功能在软件中需通过设置压力程序的方式实现, 只能使用压力控制模式
<b>保留时间锁定</b>	5 点压力准确锁定	没有校正	正构烷烃, 计算保留指数校准保留时间
<b>MS 部分</b>			
离子源	EI, CI	EI, EI/CI 混合源, CI	EI, NCI, PCI (NCI 与 PCI 是两个源)
EI 离子源	HES、Extractor、SS、Inert Extractor 离子源为主流配置	AEI、ExtractaBrite ExtractaBrite 为主流配置 AEI 不支持 CI 源、真空锁	只有一款 EI 源
离子源清洁保护功能	离子源自清洁功能, 离子源可在不停机的条件下进行自动清洁工作。	有真空锁功能, 但离子源仍需取下清洗, 离子源易污染。AEI 不可配置真空锁	有在线 GPC 净化系统。但由于采用小型 GPC 柱, 无法达到离线 GPC 的净化效果, 且存在操作维护复杂, 故障率高的缺陷。
四极杆质量分析器	石英镀金双曲面四极杆 (专利), 可加热避免污染	圆柱形钨四极杆, 不可加热	圆柱形钨四极杆, 不可加热
仪器检测限指标 (EI) (八氟萘 OFN)	HES: <1.5fg OFN Extractor: <10fg OFN 均为验收指标	AEI: <1fg, 不做验收 ExtractaBrite 没有 IDL 指标	无 IDL 指标
scan 验收信噪比	HES: 300: 1 (0.1pg OFN) Extractor: 1500: 1 (1pg	AEI: 300: 1 (0.1pg OFN) ExtractaBrite: 2000: 1 (1pg	2000: 1 (1pg OFN)

	OFN)	OFN)	
PCI 信噪比	1200: 1 100pg BZP	300: 1 100pg BZP	500: 1
NCI 信噪比	2000: 1 200fg OFN	2000: 1 200fg OFN	500: 1
离子源电离能量	10-300ev	10-150ev	10-200ev
最大离子源温度	350 °C	350 °C	300°C
灯丝电流	0-315μA	0-350μA	5-250μA
质谱扫描范围	1.6-1050	1.2-1100	2-1090
扫描速度	20000 amu/s	20000 amu/s	20000 amu/s
工作站及语言支持	Masshunter 中英日三种语言	Chromeleon, 支持中文	GCMSSolution, 支持中英日三种语言
价格	85 万	90 万	88 万

拟选择的 5977C 是目前安捷伦公司 GCMS 的最高型号, 适合于用于农副产品、食品、植物样品、动物组织、水产品、环境等样品中农药、兽药、食品添加剂、生物毒素等小分子有机物的定性、定量及化学结构分析。

目前生产 GC-MS 的厂家主要有安捷伦、赛默飞世尔、岛津等公司, 根据对本实验室的明确需要, 因此主要针对安捷伦公司的 5977C, 赛默飞世尔公司的 ISQ 7000、岛津公司的 QP 2020NX 仪器进行了深入的调研和比较, 结果表明, 从性能和价格的综合因素考虑, 安捷伦公司的 5977C 优势更为突出, 原因如下:

1) 市场占有率, 安捷伦四极杆质谱仪用户众多, 拥有 55% 以上的市场占有率, 占据市场第一, 自上世纪 70 年代推出市场来, 一直定位于气质联用检测的高端市场, 同时, 产品设计不断突破创新, 5977C 是其 2020 年推出的成熟产品, 更稳定, 更方便用户使用。而赛默飞世尔公司的产品的型号一直在变, 不稳定; 而岛津公司的质谱是相比较较为低端的产品, 高端用户量相对较少。

2) 从市场认可程度以及公司主打技术和产品的角度看安捷伦, 赛默飞世尔和岛津公司都是国际上知名的公司, 每个公司的产品都有自己的优势—岛津公司的紫外分光光度计、常规的气液相等产品一直为崇尚性价比的人士所认可; 赛默飞世尔公司的高分辨质谱, 比如 Orbit-trap 在市场上也有较高的知名度; 而安捷伦公司则始终在质谱界卓越和领先。在过去 30 年中, 安捷伦奠定了行业中最大的四极杆质谱仪供应商的地位。安捷伦质谱仪以其卓越的性能, 特别是易于操作和可靠性得到业界的一致好评。

3) 安捷伦公司在众多行业提供广泛而成熟的应用: 安捷伦公司强大的应用支持团队为 5977C 四极杆气质联用仪的在各行各业提供强有力的应用支持, 提供整体解决方案。包括利用 GCMS 对食品中的农药残留的分析, 利用 GCMS 测定环境大气、水、土壤中的 VOCs 及 SVOCs, 利用 GCMS 筛查药物基质中 ppb 级基因毒性杂质的应用, 利用 GCMS 快速筛选材料中 RoHS 及 SVHCs 相关物质, 利用 GCMS 侦测人体组织内的违禁药物及毒品等等。

4) 售后服务方面, 安捷伦公司是行业内最先开通 800 电话服务的公司, 其售后服务有口皆碑, 并且是唯一通过 ISO9001 认证的公司和连续两次获得全国工商联的十佳售后服务奖。

5) 综合竞争力, 安捷伦公司从气相, 单四级杆气质, 串接四级杆气质, 飞行时间高分辨质谱气质整条生产线, 而且各个产品都被广大用户认可, 且每个产品的市场占有率均为第一。可确保用户能在购买仪器后能及时快速的开展工作并得到支持。赛默飞世尔公司尽管产品也不少, 但在技术和市场认可度方面都不好。同时售后服务和应用支持跟不上。岛津公司也存在同样的问题。

综上所述, 拟首选美国安捷伦公司, 次选美国赛默飞世尔公司或日本岛津公司的气相色谱四级杆质谱联用仪产品。

3.采购设备为进口设备的,请勾选有关选项,并明确阐述采购进口设备原因

☐中国境内无法获取: ☐无法以合理的商业条件获取: ☒其他

原因阐述:

对有机小分子化合物的分析往往被应用于食品、环境、化工、材料、医药、刑侦等各个领域。这些分析工作又往往被分为定性分析和定量分析两个方面。过去,要实现有机小分子化合物定性定量分析,通常采用色谱的方法。即,利用每个化合物色谱行为的差异或保留时间的差异来进行定性;利用每个化合物谱峰信号强度的大小来进行定量。而这样分析的结果,又往往因为样品组成成分的复杂以及色谱分离的不完全而出现偏差。

随着质谱技术的日益成熟,色质联用技术被广泛地应用于各行各业的分析领域,并逐步替代单纯的色谱分析成为定性定量分析的常规手段。其中四极杆气相色谱质谱联用仪即为其中最为成熟和常见的一种。气相色谱质谱联用仪擅长应用于对挥发性及半挥发性小分子有机物的定性定量分析。其在质谱端通过电子轰击的方式将化合物电离,再由四极杆质量分析器进行带电碎片质量的分离,最后由电子倍增器检测到信号并放大。由于全世界多年来已统一了对化合物的轰击能量,从而使世界各地对同一化合物得到的质谱图信息都极为相似,这为建立公共的谱库提供了技术支持。如今,已被商业化的公共谱库收录的标准质谱图信息已超过 30 万张。只需将实验室得到的谱图与这些谱库中的标准谱图加以比对,即可得到更为准确的定性结果。同时,仅选择对化合物的某些特征基团所形成的质谱信号进行选择监测,则可以极大地排除样品中的大量干扰,为准确定量提供了保证。

因此,气相色谱质谱联用仪已成为当前挥发性及半挥发性小分子有机物的定性定量分析工具的首选。

4. 本单位同类设备使用情况(设备数量分布、预约共享等情况)

目前平台只有一台气相色谱串联质谱,该仪器是 2006 年购置,年使用机时 1280 小时,利用率比较高,需要排队预约。为满足现在复杂样品的分析急需配备一台气相色谱串联质谱,以缓解目前使用仪器紧张的问题。

5. 校内同类设备使用情况(设备数量分布、预约共享等情况)


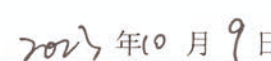

目前全校有 4 台,三重四极杆气相色谱质谱联用仪(GCMS-TQ8040)使用机时 3330,气相色谱串联质谱(GCMS8050)使用机时 1280,气相色谱仪-串联质谱仪(TSQ8 000 Evo)使用机时 6892,气相色谱质谱联用仪(7890B-7000D)使用机时 34,前 3 台利用率比较高。

6.设备购置的必要性(学科发展、平台需求、支撑科研教学、社会服务情况等)

针对目前功能食品及是否风味现状既检测限更低、基质更复杂、检测的化合物种类越多等,经常遇到基质干扰大、共流出严重、灵敏度不够、常有未知风味成分及功能成分要确认等分析难题,我院现有检测设备已无法满足要求,因此希望尽快引进此气相色谱-四极杆质谱仪解决现有难题,提高我院的检测及科研水平,拟用其进行以下各项工作,1)作物食品中特征风味物质的筛查和定性表征 2)功能食品中功能成分的定性及定量分析,及功能评价。

通过气相色谱质谱联用仪可以解决药物杂质分析、中药活性成分检测、高通量农兽残筛查、环境中超痕量有机污染分析和挥发性小分子代谢物定性和定量分析等问题。与现有 PCR 仪、超纯水机、原子吸收分光光度计、超声波清洗机等设备配合使用,可组成作物品质生物学与营养健康平台的测试分析实验,完成样品的生物材料的高空间分辨率成像、植物光合效率测定、植物倍性检测、代谢组分分析等多项测试实验,为产出一批具有重大影响的原创性、标志性科研成果提供技术支撑。不存在单独购置无法完成实验项目的情况。

预计 2-3 年内可培养研究生 70-80 名,发表高水平 SCI 论文 2-3 篇。可为本科实验教学提供


<p>重要的仪器设备，满足每年 80-100 名本科生的实验使用，同时也能给科研院所或企业提供技术服务培训，促进仪器的共享利用。</p>	
<p>7. 现有支持条件说明（明确设备安装地点、设备管理人员、配套设施、运行环境、是否参加共享等信息）</p> <p>所属平台名称：作物品质生物学和营养健康平台</p> <p>安装地点：岱宗校区国重楼 814 房间</p> <p>安装环境（水电、承重等）：水电安全</p> <p>配套设施（空调系统、通风系统等）：已具备安装所需的配套设施</p> <p>人员配备（人员数量、岗位类型、专兼职情况等）：配备两名专职教师</p> <p>安全管理（安全设施配套与制度）：具备相应的安全设施配套与制度</p>	
<p>8. 使用效益预测与共享实施方案</p> <p>共享实施方案：院内共享+校内共享</p> <p>年使用机时预测：1000</p> <p>全年开机时间：必要的开机准备时间+测试时间+必须的后处理时间 1200</p> <p>申请人（签字）：</p>	
<p>9. 申购单位意见：</p> <p>该申购设备，是否符合本单位学科发展 <input checked="" type="checkbox"/>是 <input type="checkbox"/>否</p> <p>是否纳入单位规划 <input checked="" type="checkbox"/>是 <input type="checkbox"/>否</p> <p>是否支持开放共享 <input checked="" type="checkbox"/>是 <input type="checkbox"/>否</p> <p>是否具备场地人员条件 <input checked="" type="checkbox"/>是 <input type="checkbox"/>否</p> <p>是否同意申购等 <input checked="" type="checkbox"/>是 <input type="checkbox"/>否</p> <p>其他意见：</p> <p>主管领导（签字）  2017 年 10 月 9 日</p> <div style="text-align: right;">  </div>	

10. 学校大型科研仪器设备论证专家组评议意见:

经过论证,专家组认为本仪器设备选型合适,性能比较突出,具备前瞻性,预算合理,安置科学,方案可行,开放共享程度较高,预期使用频次较高,能够对作物品质生物学与营养健康仪器组平台的发展、人才培养、科学研究等形成有力支撑。设备购置将有利于促进作物学科的良好发展,有力支撑相关研究的开展。

专家组一致同意申报单位购置本仪器设备。

专家签字:



专家组组长:



2023年10月10日