

LC-QUADROPOLE-QTOF UCUŞ ZAMANLI KÜTLE SPEKTROMETRESİ (LC-QTOF-MS) TEKNİK ŞARTNAMESİ

- 1.Sistem içeriği 1 adet LC-QTOF-MS Kütle Spektrometresinden oluşmalıdır.
- 2.Sistem, Quadropole-TOF-MS kütle seçici dedektör ve hızlı ayrımlı LC cihazı içermelidir.
- 3.QTOF sisteminin MS/MS moduna sahip olması ve tek enjeksiyonda daha fazla parametrenin çalışabilmesine imkan vermelidir.
- 4.Cihazın kütle aralığı en az 50- 1,250 m/z arasında olmalıdır.
- 5.Sistem Autotune özelliğine sahip olmalı ve iyon optikleri ile tam QTOF MS kütle eksen kalibrasyonunu otomatik olarak optimize etmelidir.
- 6.Gömülü Verileri çıkarma (Data Mining) araçlar sayesinde tek tuşla "bileşik bul" algoritmalarını kullanarak bileşiğe özgü spektral ve kromatografik bilgileri ekstrakte edebilmelidir.
- 7.Sistem üç boyutlu analize olanak tanıyacak ion mobility özelliğe sahip olmalıdır.
8. Sistemin ölü hacmi en fazla 100 µl olmalıdır.
9. Sistemin çalışabileceği pH aralığı 2-12 veya daha geniş aralıkta olmalıdır.
- 10.Sistem vialler arasında; otomatik olarak ön hazırlık (seyreltme, ekleme vb.) yapabilmelidir. olmalıdır.
- 11.Otomatik örnekleyici Flow-Through tasarımı olmalı ve iğne yıkaması programlanabilir olmalıdır.
- 12.Numune infüzyonu LC ünitesinden gelen akış ile birleştirilerek yapılmalıdır.
- 13.İyon kaynağı numunelerden gelebilecek kirliliklerden analizörü korumak amacı ile numunenin sisteme giriş noktası ile kütle analizörüne giriş noktası arasında en az bir adet ortogonal dizaynda olmalıdır.
- 14.Spray ile aynı yönde veya en fazla 90° çift açılı uygulama yapan sıcaklığı ve debisi ayarlanabilen kurutma gazı uygulaması (jet stream) olmalıdır.
- 15.Sistemde pozitif ve negatif iyonlaştırma standart olarak bulunmalıdır.
- 16.Kütle dedektörüne entegre en az bir adet yönlendirici valf olmalı ve bu valf ile LC akışı en az atık ve Q-TOF dedektör arasında yönlendirilebilmeli, herhangi bir söküp takma işlemine gerek olmadan tune solüsyonu spraye yönlendirilebilmelidir.
- 17.Otomatik kütle doğrulaması için iyon kaynağı dual elektropray (dual ESI) içermelidir. Ana elektropray numune için, ikinci elektropray ise online kütle doğrulamasında (referans uygulaması) kullanılacak referans madde için kullanılmalıdır.
- 18.Sistem, daha sonra istenildiğinde opsiyonel olarak APCI, APPI, nano akış, gaz kromatografi ve kapiler elektroforez arayüzü ve chip iyon kaynakları takılabilmeye uygun olmalıdır.

19. Kuadrupol girişinde iyon iletimi verimliliğini arttıran, dual ion funnel-hexobore sampling capillary kombinasyonu bulunmalıdır.
20. Parçalama enerjisi dijital olarak kontrol edilmelidir. Parçalama gazı girişi, vakumlanması, regüle edilmesi tamamen data sistemi tarafından kontrol edilmelidir. Parçalama ünitesi altı kutuplu (hexapole) tipte olmalıdır.
21. İyonlar ortogonal olarak pulse şeklinde gönderilmelidir.
22. Kuadrupol kütle aralığı en az 4000 (dörtbin) m/z, TOF kütle aralığı en az 10.000 (onbin) m/z olmalıdır.
23. Sistemin tarama hızı en az 50 (otuz) spektrum/saniye olmalıdır.
24. TOF kütle rezolüsyonu 42.000 (kırk bin) FWHM'den büyük olmalıdır.
25. Cihazın hassasiyeti 1 (bir) pg reserpin maddesi kullanıldığında MS/MS modda en az 4.500:1 olmalıdır.
26. Kütle doğruluğu en fazla 1 (bir) ppm olmalıdır.
27. Sistemde en az iki adet ön pompa, iki adet de turbo moleküler pompa bulunmalıdır.
28. Yazılım analiz sonucu elde edilen kromatogram pik spektrumlarından maddelerin kapalı formüllerini üretebilmelidir.
29. Yazılım ile birlikte en az 20.000 adet madde bulunan metabolitleri içeren veritabanı, en az 1600 adet pestisit ve metabolitlerini içeren veritabanı ve en az 7500 adet toksikolojik ve uyuşturucu maddeleri ve metabolitlerini içeren veritabanları verilmelidir.
30. Yazılım metotta tanımlanan sinyal eşik değerini geçen tüm iyonlar için otomatik olarak MS/MS yapabilmelidir. Bu verileri kullanarak kütüphane taraması yapabilmelidir.
31. Yeni veritabanları yapılabilir ve mevcut veritabanlarına yeni madde girişi yapılabilir ve tarama için kütle spektrumları yanında alıkonma zamanı bilgileri de kullanılabilir.
32. Yazılım elde edilen kromatogram içerisinden kapalı formülü girilen maddeleri tarayabilmelidir.
33. Yazılım miktar tayini için MS ve MSMS datalarının her ikisini de kullanabilmelidir.
34. Yazılım, analiz sonucunda elde edilen moleküler iyon ve parçalanma ürünlerini baz alarak, maddelerin açık yapısını ve fonksiyonel gruplarının aydınlatılmasını sağlamalıdır.
35. Yazılım, molekülün açık yapısı tayini için yardımcı olarak kullanıcı tarafından verilecek kapalı formülü kullanabilmelidir.
36. Yazılım uygun yapı tahminleri yaparken bilgisayarda bulunan veri tabanlarını veya internet üzerinden erişimi bulunan veri tabanlarını (Chempider v.s.) kullanabilmelidir.
37. Yazılım, parçalanma iyonları için de kapalı formül üretebilmeli ve parçalanma iyonunun yapısını, ana iyon ile ilişkilendirerek gösterebilmelidir.

38.Yazılım, kapalı formül içeriğinde bulunması istenen farklı elementler var ise, bu elementlerin seçimli olarak kapalı formül hesaplanmasında dikkate alınmasını sağlayabilmelidir.

39.Sonuç tarama işleminde, minimum skor değeri, maksimum olasılık sayısı, minimum referans değeri gibi tarama işlemini daha kolaylaştırıcı istatistiksel değerler sonuçlar ile birlikte gösterilmelidir.

40.Yazılım, tarama işlemi sırasında, yapıda olası beklenen ve beklenmeyen fonksiyonel grupların seçilmesine izin verecek filtreleme özelliğine sahip olmalıdır.

41.Sistem ile verilecek veri tabanları ve kütüphaneler broşürde gösterilerek özellikleri açıkça beyan edilmelidir.