

液体クロマト四重極質量分析装置(Q-TOF)機器仕様

1. 総則

- (1) この仕様書は、液体クロマト四重極質量分析装置(Q-TOF)(以下、「機器類」という。)の調達に適用するもので、機器類は、少なくとも下記に定める性能を満たすほか、十分な耐久性、信頼性と良好な操作性能を有するものとする。
- (2) この仕様書に明記されていない事項について、疑義が生じた場合は発注者と受注者が協議の上決定するものとする。

2. 機器類概要

- 装置名:液体クロマト四重極質量分析装置(Q-TOF)
- 構成:本体 一式、ワークステーション 一式

3. 機器類構成

下記は機器類一式の構成を示す。

- 液体クロマトグラフ 一式
- 質量分析装置 一式
- 窒素ガス発生装置 一式
- データ処理装置 一式
- 付属品等 一式

すべてのシステム(質量分析装置、高速液体クロマトグラフおよびソフトウェア)は1社によって製造、サポートがなされていること

4. 各構成要素の仕様

機器類は液体クロマトグラフ、質量分析装置、窒素ガス発生装置、データ処理装置により構成されたシステムであり、以下の要件を満たすこと

4. 1. 液体クロマトグラフ

- 溶媒は 4 溶媒接続可能で、そのうち 2 溶媒以上によるグラジエントが可能なこと
- デガッサを内蔵していること
- ポンプ耐圧は 80MPa 以上であること
- 流量範囲は 0.001~5ml/min、0.001mL 単位で設定、かつ 80MPa で使用可能であること
- リークセンサーを標準装備していること
- ポンプ内にディレイカラムを切り替え可能な多機能バルブが搭載されており、ソフトウェア上の操作で通液流路の切り替えが可能であること

- ポンプ部のプランジャーストロークが自動可変であること
- ユーザー側でポンプヘッドのメンテナンスを行える構造であること
- サンプルの注入は 0.1～20 μL の範囲であること
- 一度に 100 本以上の 2mL バイアルがセット可能であること
- 注入精度は $<0.15\%\text{RSD}$ または $\text{SD}<10\text{nL}$ のいずれか大きい方であること
- オートサンプリングには 5～40℃ の範囲を満たす温調機能を備えていること
- ニードルを洗浄する機能が搭載されていること
- オートサンプリング以降の接液部の材質は、主成分として鉄を含まない不活性な素材で構成されていること
- カラム恒温槽は室温マイナス 20℃ から 110℃ まで制御可能であること
- カラム恒温槽には 300mm のカラムを 4 本以上収納可能であること
- カラム恒温槽には流路切り替え用のバルブを搭載でき、4 本のカラムおよび移動相置換とパージ用の廃液ラインを含めて 4 ポジション以上の切り替えがソフトウェア上から出来ること
- カラム接続時に、工具を用いず簡便に接続可能であり、再現性よく低デッドボリュームで接続できる構造であること
- フォトダイオードアレイ検出器は波長範囲 190～950nm であること
- フォトダイオードアレイ検出器の波長バンド幅は 1、2、4、8、16nm のいずれかで設定可能であること
- 検出器タイプは 1024 素子のダイオードアレイであること
- 制御 PC を立ち上げなくても LC 部のパージやカラム平衡化を行えるモジュールを搭載していること

4. 2. 質量分析装置

- 四重極-飛行時間型の LC/MS/MS システムであること
- イオン化法はエレクトロスプレー法および大気圧化学イオン化法を搭載でき、各イオン化法に対応したイオンソースを真空解除せずに切り替えられること
- エレクトロスプレーイオン法については、加熱ガス等を用いたイオン化効率向上機構を有し、高感度分析が可能であること
- 正イオンおよび負イオンの同時取得に対応していること また、同時取得に際して専用部品を必要とする場合は、当該部品の予備を 3 セット付属すること
- イオン導入は直行型であること
- ネブライザーは位置調整不要なこと
- ネブライザーはアース電位であること

- 真空を解除せずにイオン導入系までのメンテナンスが出来るイオンソースであること
- 質量測定範囲は m/z : 20~10,000 であること
- 検出器はエレクトロマルチプライヤー方式であること
- 質量分解能は m/z 2722 において、60,000 以上かつ、 m/z 118 において、35,000 以上であること
- MS/MS 感度は上記分解能を維持した状態で、1pg Reserpine に対して、S/N 3,000:1 以上であること
- MS モードの質量精度は 0.5ppm 以下であること
(m/z 609.2807 において 10 回繰り返し精度、RMS)
- MS/MS モードにおける質量精度は 2ppm 以下であること
(m/z 397. 21122 において 10 回繰り返し精度、RMS)
- スペクトル採取速度は 50 スペクトル/秒以上であること
- MS/MS スペクトル採取速度は 50 スペクトル/秒以上であること
- 有効飛行長は 3m 以上であること
- コリジョンガスは窒素ガスであること
- 質量校正液を内蔵しておりソフトウェア制御で校正液が自動流路切り替えて MS に供給され、マス軸、分解能、感度の調整を自動で行えること

4. 3. 窒素ガス発生装置

- 窒素ガス純度、窒素発生量ともに分析に支障なく供給が可能であること。

4. 4. データ処理装置

- CPU は制御及びデータ解析による負荷を迅速に処理できる十分な性能を備えていること
- メモリーは 64GB 以上であること
- ストレージは 1TB SSD 以上であること
- 24 インチ以上の液晶カラーモニターを備えること
- ソフトウェアは液体クロマトグラフ、質量分析部のパラメーターを一つのソフトウェアにおいて一括でコントロール可能であること
- 日本語ソフトウェアで装置の制御、データ解析が行えること
- チューニングをスケジュール管理で自動実施できる機能を搭載していること
- データ解析において偽陽性判定のために、複数のフラグメントイオンを同時採取し、その結果とライブラリのデータを比較する機能を有すること
- 定量分析時に各化合物の化合物において、保持時間、QT 比、SN 比、ピーク形状をもとにピーク検出を検出・要検討・非検出等の 3 段階以上に自動で判定する機能を有すること

- 測定データの CSV ファイル出力が一括してできること(データとは物質名、保持時間、面積、IS 比、濃度等)
- 制御用ソフトウェアはメーカー最新のもので、日本語表記操作に対応していること
- 多群間の比較を簡易的に行える多変量解析ソフトを有すること
- 200,000 化合物以上の代謝物と天然物、化学物質に特化した精密質量データベースを有すること
- 9,000 化合物以上の精密質量および MS/MS スペクトルが登録された NIST ライブラリを有すること
- 代謝物のデータベースから MS/MS スペクトルの結果をもとに、機械学習を利用した構造推定を行えること その際、1年間に10万回以上の検索が可能であること
- 標準品を用いて検量線を作成し、目的化合物の定性、定量が可能であること(ターゲットスクリーニング)
- 既存のデータベースに加えて、新規で追加したデータベースに登録されている全化合物を測定したクロマトグラムに検索可能であること、その際の同定には化合物の組成式情報から得られるモノアイソトピック質量、同位体比の一致度、同位体の間隔が同時に考慮されていること、さらに保持時間、MS/MS スペクトル情報も同時に考慮されていること(サスペクトスクリーニング)
- 解析ソフトウェアに標準装備されているピーク抽出機能を用いて、測定結果から特定の質量数を選ぶことなく、全化合物のクロマトグラム抽出が可能であること
- 抽出した化合物ピークに対して、既存または新規で導入する精密質量データベースライブラリーを用いて、組成式情報(モノアイソトピック質量、同位体比の一致度、同位体の間隔)及び MS/MS スペクトルから定性が可能であること(ノンターゲットスクリーニング)
- PC に Microsoft Excel がインストールされていること
- 光学走査式のマウスと、101 キー以上のキーボードを有すること
- A4サイズの印字が可能なレーザープリンタを有すること
- 解析用ソフトウェアライセンスを本体解析用以外に 1 式付属すること

4. 5. 付属品等

- 紙媒体の日本語操作マニュアル及び取扱説明書一式を付属すること
- 機器操作手順書、及びメンテナンスの手順書を付属すること
- その他、本装置を正常に稼働させるに必要な付帯装置、付属品を備えていること

5. サポート・設置・トレーニング

- 機器類の配置、配管及び配線等については、安全性に考慮し、適切に施工を行うこと
- 必要な電源設備の増設・改修工事を含むこと
- 現地での搬入設置・動作確認作業を含むこと
- 既存の設置台(横幅 120 cm、奥行 75 cm)に質量分析装置が収まること
- 装置の操作方法について、装置利用者用トレーニング 2 回と管理者用メンテナンスを含むトレーニングの計 3 回の講習会を行うこと
- 無償保証(令和9年度から7年間保証、点検7回)を一式に含むこと
- 管理者が指定する場所へ、既存装置(Agilent6540 LCMS システム)の移動を含むこと

6. 納入場所

沖縄健康バイオテクノロジー研究開発センター 分析機器室
(沖縄県うるま市州崎 12-75)

7. 納入期限

令和 9 年 3 月 31 日(水)