

Specifikace UHPLC

Pumpa	vysokotlaké binární směšování
	gradientová pumpa s tlakovým limitem minimálně 1300 bar při průtoku do 2 ml/min
	možnost průtoku od 1 µl/min až do 5000 µl/min s možností nastavení průtoku s krokem max. 300pL
	mísení mobilní fáze v rozsahu od 1 do 99%
	vestavěný vakuový degasser
	mrtvý objem s mixérem max 50 µl
Autosampler	automatický a programovatelný oplach pístů
	kapacita min 100 ks 2 ml vialek
	možnost rozšíření až na 400 ks 2 ml vialek v rámci stejného modulu bez nutnosti přikoupení dalšího chromatografického modulu
	chlazení vzorků až na teplotu 4°C
	tlaková odolnost minimálně 1 300 bar
	možnost nástřiku v rozsahu 0,1 – 20 µl
Kolonový prostor	carry over < 30 ppm
	termostatování kolon od 20 °C pod okolní teplotu až do 100 °C bez nuceného oběhu vzduchu
	současné zapojení až 4 kolon o délce až 25 cm nebo 8 kolon o délce 10 cm
	teplotní stabilita $\pm 0,05$ °C
	teplotní přesnost $\pm 0,5$ °C
	dvě oddělené kolonové zóny, samostatně ovládané

Specifikace DAD detektor a MS detektoru

Detektor diodového pole	diodové pole s 1024 diodami
	vlnová délka nastavitelná v rozsahu 190-640 nm
	online sběr spekter
	tvorba vlastní knihovny spekter
	rychlost sběru dat min 220 Hz
	vysoce citlivá cela s optická dráhou min.10 mm o objemu max. 1 ul
Hmotnostní spektrometr typu trojitého kvadrupólu	Ionizace elektrosprejem
	Orthogonální iontový zdroj využívající přehřátý sušící plyn pro vyšší efektivitu ionizace a desolvatace
	Přenos iontů mezi atmosférickou a vakuovanou částí přístroje zajišťuje kapilára delší než 8 cm.
	Citlivost v pozitivním ESI MRM režimu pro reserpin provyžděná jako přístrojová mez detekce (instrument detection limit, IDL) *) maximálně 5 fg na kolonu
	Citlivost v negativním ESI MRM režimu pro chloramphenicol vyžděná jako přístrojová mez detekce (instrument detection limit, IDL) *) maximálně 5 fg na kolonu
	Lineární dynamický rozsah alespoň 6 řádů
	Doba přepínání polarity (pozitivní/negativní ionty) maximálně 30 ms
	Rychlost sběru dat alespoň 16,000 Da/sec
	Minimální nastavitelný dwell time ≤ 0,6 msec
	Hmotnostní rozsah alespoň 5-3000 Da
	Systém umožňuje provádět následující typy měření: MS sken, MS SIM, MS/MS MRM, MS/MS měření neutrální ztráty, MS/MS sken produktových spekter, MS/MS sken prekurzorových iontů, MS/MS MRM s možností nastavení až do 9 MRM přechodů spouštěných intenzitou primárního MRM přechodu
Software	Jednotný software pro ovládání kapalinového chromatografu i hmotnostního spektrometru
	Software pro vyhodnocení dat, s možností kontroly kvality měření pomocí sledování parametrů jednotlivých píků a jejich shody s uživatelem nastavenými kritérii (poměry MRM přechodů, shodu s produktovým spektrem, přesnost, správnost, odchylky retenčního času, symetrie píku atd.) Automatické načtení těchto parametrů z analýzy standardů. Software musí také umožňovat automatické vyhodnocení QC vzorků a odečet blanku z kalibrace.
	Software pro optimalizaci MRM přechodů. Možnost automatické optimalizace alespoň 7 MRM přechodů současně s využitím jak přímé infuze tak i po chromatografické separaci roztoku standardu či vzorku. Software na základě sumárního vzorce automaticky vybere nejintenzivnější prekurzor, detekuje produktové ionty a nalezne pro ně optimální kolizní energii. Software dále musí umožňovat vedení databázi optimalizovaných MRM přechodů včetně retenčních časů (při optimalizaci s chromatografií) a jejich automatický export do měřicí metody.
	Software pro automatické ladění všech parametrů iontového zdroje
	Softwarově automatizované rozložení MRM přechodů podle retenčních časů analytů s automatickou optimalizací dwell time v každém bodě pro dosažení konstantního počtu bodů přes každý chromatografický pík, bez ohledu na počtu analytů měřených paralelně v daném časovém okně
	Možnost sběru až 7 doplnitelných MRM podmíněných intenzitou signálu hlavního MRM přechodu, včetně možnosti využití knihoven s fragmentačními spektry
Řídící PC	S parametry dostačujícími k ovládání zařízení a zpracování dat
	laserová barevná tiskárna, 2x monitor min 22", myš, klávesnice

Přístroj HPLC-MS bude umístěn v místnosti C3.047

Garanti a osoby pro zaškolení obsluhy: doc. Dohnal, dr. Skarka, dr. Andrys

*) Postup stanovení IDL

Přístrojová mez detekce (Instrument Detection Limit, IDL) se vypočte následujícím způsobem:

$IDL (fg) = t \times (\%RSD / 100) \times \text{nastřikované množství (fg)}$

tkritická hodnota Studentova rozdělení dat pro 99% hladinu spolehlivosti s n – 1 stupni volnosti,
 %RSD = relativní směrodatná odchylka plochy píku získaná n měřeními

V případě, že Instrument Detection Limit (IDL) není součástí oficiální dokumentace výrobce, musí být doložen výsledky měření a dodavatel musí být schopen jej prokázat během instalace.