

ОПИСАНИЕ ТИПА СРЕДСТВ ИЗМЕРЕНИЙ
для Государственного реестра средств измерений



УТВЕРЖДАЮ
Директор БелГИМ

В.Л. Гуревич

» 04 _____ 2016

Масс-спектрометры квадрупольные серии 4500	Внесены в Государственный реестр средств измерений Регистрационный № <u>РБ03-11-5926-16</u>
---	---

Выпускают по технической документации фирмы «AB SCIEX Pte.Ltd.» (Сингапур).

НАЗНАЧЕНИЕ И ОБЛАСТЬ ПРИМЕНЕНИЯ

Масс-спектрометры квадрупольные серии 4500 (далее – масс-спектрометры) предназначены для качественного и количественного химического анализа сложных природных и синтетических смесей веществ.

Область применения – в химической, нефтехимической, пищевой, фармацевтической отраслях промышленности, для целей санитарного и экологического контроля.

ОПИСАНИЕ

Принцип действия масс-спектрометров заключается в ионизации компонентов смеси и последующем их разделении и детектировании отношения массы к заряду (m/z).

Масс-спектрометры оборудованы набором квадрупольных фильтров, которые пропускают ионы в зависимости от их отношения массы к заряду (m/z). Квадруполь Q1 – это фильтрующий квадруполь, который сортирует ионы до их проникновения в реакционную ячейку Q2. В реакционной ячейке Q2 внутренняя энергия ионов увеличивается посредством столкновения с молекулами газа до тех пор, пока это не приведет к разрушению молекулярных связей и образованию дочерних ионов. Этот метод позволяет пользователям производить эксперименты для измерения m/z дочерних ионов с целью определения состава родительских ионов. После прохождения через реакционную ячейку Q2 ионы попадают в квадруполь Q3 для дополнительной фильтрации, а затем перемещаются в детектор. В детекторе ионы создают ток, который преобразуется в импульс напряжения. Выходящие из детектора импульсы напряжения прямо пропорциональны количеству ионов в детекторе. Система контролирует эти импульсы и преобразует информацию в сигнал, который соответствует потоку ионов для конкретного значения m/z , а система представляет эту информацию в виде масс-спектра.

Масс-спектрометры разработаны для жидкостной хроматографии и могут использоваться в составе с различными системами ВЭЖХ. Ионизация компонентов осуществляется с использованием сменных источников ионов, которые реализуют различные типы ионизации:

- ионизацию электростатическим распылением (TurbolonSpray),
- химическую ионизацию при атмосферном давлении (APCI),



- фотоионизацию при атмосферном давлении (APPI).

Масс-спектрометры могут осуществлять сканирование в квадрупольном режиме и режиме линейной ионной ловушки.

В квадрупольном режиме сканирование может осуществляться одним из следующих методов:

- Q1 MC (Q1): полное сканирование с использованием первого квадруполь (Q1). Интенсивность ионов измеряется для каждой массы в диапазоне сканирования;

- метод множественных ионов Q1 (Q1 MI): тип сканирования для выбранных ионов с использованием квадруполь Q1. Интенсивность ионов измеряется только для указанных масс;

- Q3MC (Q3): полное сканирование с использованием третьего квадруполь (Q3). Интенсивность ионов измеряется для каждой массы в диапазоне сканирования;

- метод множественных ионов Q3 (Q3 MI): тип сканирования для выбранных ионов с использованием квадруполь Q3. Интенсивность ионов измеряется только для указанных масс;

- MRM: режим MC/MC сканирования, в котором выбранный пользователем ион проходит через квадруполь Q1 и фрагментируется в реакционной ячейке Q2. После этого квадруполь Q3 используется для выделения того ионного фрагмента, который попадает в детектор. Этот режим сканирования используется в основном для количественного анализа;

- дочерний ион (MC2): режим полного MC/MC сканирования, где квадруполь Q1 зафиксирован для пропускания определенного родительского иона, а квадруполь Q3 сканирует определенный диапазон масс. Этот метод используется для идентификации всех дочерних ионов конкретного родительского иона;

- родительский ион (Prec): режим MC/MC сканирования, в котором квадруполь Q3 зафиксирован для определенного соотношения массы к заряду для пропускания определенных дочерних ионов, а квадруполь Q1 сканирует диапазон масс. Этот метод используется, чтобы подтвердить наличие родительского иона или чаще всего для идентификации соединений, имеющих общий дочерний ион;

- потери нейтральных частиц (NL): метод MC/MC сканирования, в котором оба квадруполь Q1 и Q3 сканируют диапазон масс, при этом сканирование осуществляется со сдвигом m/z , равным массе нейтральной потери. Отклик наблюдается, если определен ион, который был выбран первым анализатором и фрагментировался путем потери нейтральных частиц (фиксированная масса). Этот метод используется, чтобы подтвердить наличие родительского иона или чаще всего для идентификации соединений, имеющих общие потери нейтральных частиц.

В режиме линейной ионной ловушки сканирование может осуществляться одним из следующих методов:

- расширенный MC метод (EMS): ионы пропускаются через квадруполь Q1 к линейной ионной ловушке, где они накапливаются. Эти ионы сканируются из квадруполь Q3 и дают один спектр MC типа;

- расширенный многозарядный метод (EMC): этот режим сканирования похож на EMS за исключением того, что перед сканированием ионов из линейной ионной ловушки есть задержка, в течение которой низкозарядные ионы (в основном однозарядные ионы) могут первыми выйти из линейной ионной ловушки;

- расширенный метод дочерних ионов (EPI): этот тип сканирования используется для получения высокоточного MC/MC спектра на конкретном ионе. Фрагментация выполняется в реакционной ячейке Q2, что обеспечивает информационно-насыщенный MC/MC спектр, типичный для столкновительно-активированной фрагментации/диссоциации. В этом режиме сканирования родительский ион, который должен быть фрагментирован, сначала выбирается в квадруполь Q1 с параметром, характеризующим относительную ширину зоны выделенных масс, ширине которого



составляет от 0,5 до 4 Да, отфильтровывая все остальные ионы. Родительский ион фрагментируется путем столкновительно-активированной диссоциации (CAD) газа в реакционной ячейке Q2. Образованные фрагментные ионы захватываются в линейной ионной ловушке и затем сканируются при одной из трех скоростей сканирования в зависимости от требуемого разрешения к фрагмент-ионам;

- повышенное разрешение (ER): этот режим сканирования похож на EMS сканирование, за исключением того, что небольшая масса 30 Да вокруг области родительской массы сканируется из линейной ионной ловушки при заданной скорости сканирования для получения узкого окна спектра с наилучшим разрешением;

- MS/MS/MS (MS3): в этом режиме сканирования родительский ион выбирается квадруполом Q1 и фрагментируется путем столкновительно-активированной диссоциации в реакционной ячейке Q2. Все образованные дочерние ионы передаются в линейную ионную ловушку, где затем выделяется один дочерний ион. Этот изолированный ион затем фрагментируется в линейной ионной ловушке, а полученные дочерние ионы сканируются из ионной ловушки на одной из трех скоростей сканирования.

Система обработки данных Analyst 1.6X позволяет полностью автоматизировать выполнение анализа: автоматическую настройку масс-спектрометра, задание и контроль режимных параметров, регистрацию выходных сигналов, обработку экспериментальных данных, включая идентификацию веществ, и выдачу протоколов с результатами анализа. Программное обеспечение включает раздел, предназначенный для проведения проверки метрологических характеристик прибора, сравнение их с требуемыми нормами и выдачу протоколов проверки.

Масс-спектрометры выпускают в двух исполнениях:

- спектрометры QTRAP 4500;
- спектрометры TRIPLE QUAD 4500.

Функционально исполнение TRIPLE QUAD 4500 отличается от QTRAP 4500 наличием режима линейной ионной ловушки, позволяющей увеличить чувствительность масс-спектрометра.

Внешний вид масс-спектрометров представлен на рисунке 1.

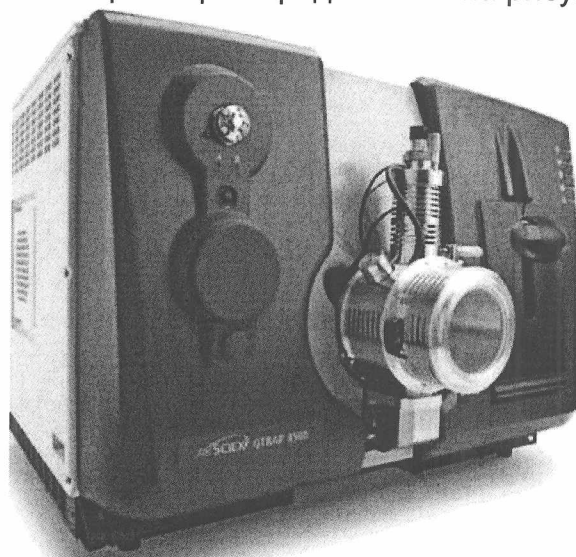


Рисунок 1 – Внешний вид масс-спектрометров квадрупольных серии 4500

ОСНОВНЫЕ ТЕХНИЧЕСКИЕ И МЕТРОЛОГИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ

Основные технические и метрологические характеристики масс-спектрометров представлены в таблице 1.
Таблица 1

Наименование	Значение	
	QTRAP 4500	TRIPLE QUAD 4500
Диапазон регистрируемых масс по шкале m/z, а.е.м., в режиме: - тройного квадрупольа - линейной ионной ловушки	от 5 до 2000 от 50 до 2000	от 5 до 2000 -
Чувствительность (отношение сигнал/шум), не менее: - в квадрупольном режиме с использованием MRM сканирования при инъекции 200 фг резерпина через жидкостной хроматограф - в режиме линейной ионной ловушки с использованием EPI сканирования при инъекции 2 пг резерпина через жидкостной хроматограф - в режиме линейной ионной ловушки с использованием MRM ³ сканирования при инъекции 2 пг резерпина через жидкостной хроматограф	1000:1 500:1 30:1	1000:1 - -
Предел допускаемого относительного среднего квадратического отклонения выходного сигнала (по площади пика) с вводом пробы через жидкостной хроматограф, %	5	
Стабильность установки шкалы масс за цикл измерений 24 ч, а.е.м, не более	± 0,1	
Условия эксплуатации: - диапазон рабочих температур, °С - диапазон относительной влажности, % - максимальное допускаемое изменение температуры, °С/ч	от плюс 15 до плюс 30 от 20 до 80 ± 2	
Диапазон температур транспортирования и хранения, °С	от минус 30 до плюс 45	
Параметры электропитания: - диапазон напряжения питания, В - номинальная частота питающей сети, Гц	от 200 до 240 50/60	
Максимальная потребляемая мощность спектрометра вместе с форвакуумным насосом, В·А	2500	
Номинальная масса, кг	130	
Номинальные габаритные размеры, мм	590×790×790	

ЗНАК УТВЕРЖДЕНИЯ ТИПА

Знак утверждения типа наносится типографским способом на титульный лист эксплуатационной документации фирмы-изготовителя.



КОМПЛЕКТНОСТЬ

Масс-спектрометр (исполнение согласно заказу).
Комплект ЗИП - 1 комплект.
Руководство по эксплуатации - 1 экз.
Методика поверки - 1 экз.

ТЕХНИЧЕСКИЕ ДОКУМЕНТЫ

Техническая документация фирмы «AB SCIEX Pte.Ltd.», Сингапур;
МРБ МП.2580-2016 «Масс-спектрометры квадрупольные серии 4500».

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Масс-спектрометры квадрупольные серии 4500 соответствуют технической документации фирмы «AB SCIEX Pte.Ltd.» (Сингапур) TP TC 020/2011, TP TC 004/2011 (декларация о соответствии № TC N RU Д-SG.AY14.B.17171 от 09.12.2014, действительна до 08.12.2017).

Межповерочный интервал – не более 12 месяцев (для масс-спектрометров, предназначенных для применения, либо применяемых в сфере законодательной метрологии).

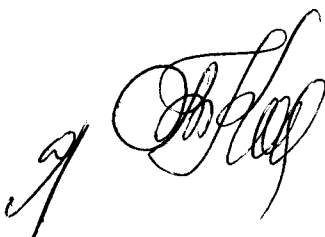
Научно-исследовательский центр БелГИМ
г. Минск, Старовиленский тракт, 93, тел. 334-98-13
Аттестат аккредитации № BY/112 02.1.0.0025

ИЗГОТОВИТЕЛЬ

Фирма «AB SCIEX Pte.Ltd.» (Сингапур)
Адрес: Blk 33, #04-06, Marsiling Ind Estate Road 3, Woodlands Central Indus. Estate, Singapore, 739256

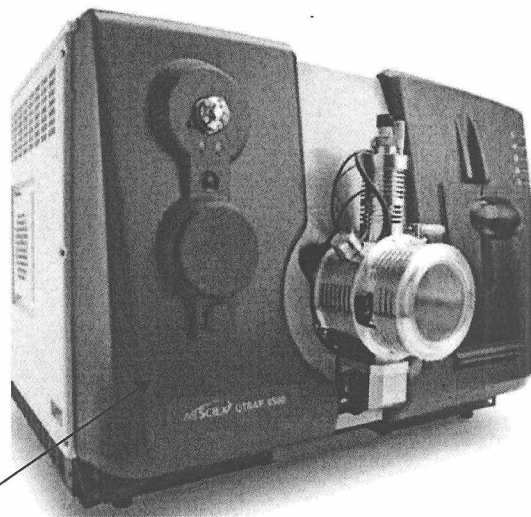
Начальник научно-исследовательского центра испытаний средств измерений и техники БелГИМ

 С.В. Курганский





ПРИЛОЖЕНИЕ А
(обязательное)



Место нанесения знака поверки
(клеймо-наклейка)

Рисунок А.1 – Место нанесения знака поверки (клеймо-наклейка)

