

要求仕様書

1. 概要

本仕様書は「液体クロマトグラフ／飛行時間型質量分析装置（LC-QTOFMS）」について定めたものである。

2. 仕様

装置は、液体クロマトグラフにて、バイオマス由来油、廃プラスチック再生油といった低炭素原料油及び原油の各留分に含まれる多数の有機成分を精密分離し、飛行時間型質量分析装置にて、各種イオン化した有機成分を質量分析部へ導入して～10万種の有機成分を定性・定量分析する。さらには、データ処理を行い各研究目的に応じた有機成分の構造解析を行う。

2. 1 試料

本装置で測定する主な候補試料は以下のとおり

(1) 低炭素原料油

- ① バイオマス由来油
- ② 廃プラスチック再生油

<参考：一般性状>

- ・JPEC フォーラム 2023（17 ページ）

https://www.pecj.or.jp/wp-content/uploads/2023/04/JPECForum_2023_program_017.pdf

- ・JPEC フォーラム 2024（18 ページ）

https://www.pecj.or.jp/wp-content/uploads/2024/04/JPECForum_2024_program_012.pdf

(2) 原油の各留分

- ① 減圧軽油（沸点 360～580℃）
- ② 常圧残油（沸点 360℃以上）
- ③ 減圧残油（沸点 580℃以上）

(3) 上記(1)～(2)のフラッシュクロマトグラフィー分画物

2. 2 装置仕様

以下に示す各部で構成されていること

- | | |
|----------------------|-----|
| (1) 液体クロマトグラフ | 1 式 |
| (2) 飛行時間型質量分析装置 | 1 式 |
| (3) 低炭素原料油用のデータ解析ツール | 1 式 |

2. 2. 1 液体クロマトグラフ

以下の各部で構成される。

- | | |
|---------------------------------|-----|
| (1) 移動相ポンプ | 1 式 |
| (2) 送液ポンプ | 1 式 |
| (3) オートサンプラー | 1 式 |
| (4) 分離カラム | 1 式 |
| (5) フォトダイオードアレイ型紫外可視吸光度検出器（PDA） | 1 式 |
| (6) 装置制御及びデータ処理用パソコン | 1 式 |

(7) HPLC 解析ソフトウェア 1式

以下に各部の仕様を示す。

(1) 移動相送液ポンプ

① 移動相溶媒容器の設置ケース

- 1 リットルの移動相溶媒容器が 4 本以上設置可能であり、4 本以上の容器を用意すること
- 移動相送液ポンプに至る配管の移動相側の先端に移動相中の不溶物を除去するための金属製のフィルターが付いていること
- 移動相溶媒容器の口にはサイズに合った蓋がついており、移動相送液ポンプへの配管用の穴が設置されていること
- 移動相溶媒容器が倒れ難い構造であり、溶媒漏洩時には設置ケースのドレインポートから最下段ユニットのドレインチューブへ導かれる構造であること

② 移動相送液ポンプ

- 最大流量が 4mL/min 以上、2 種類の移動相と内径 5mm 前後の分析カラムを使用した高圧グラジエント分析が可能な移動相送液ポンプを 1 台有すること
- デガスの機能を有し、デガッサーの容量は 0.5mL 以下であること
- 流量精度は流量 0.05~4.00 mL/min にて再現性 0.05% RSD または±0.04 min SD 以内であること
- 移動相送液ポンプの耐圧は流量 0.05~3.00mL/min において 70MPa 以上であること
- 移動相送液ポンプのプランジャーシールは順相系溶媒（ヘキサン、クロロホルムなど）と逆相系溶媒（水、メタノールなど）に耐える材質であること
- 設定した圧力を超えた場合に自動停止する機能を備えていること

(2) 送液ポンプ

- フォトダイオードアレイ型紫外可視吸光度検出器と後述する飛行時間型質量分析装置の間に送液（試料導入）ポンプを 1 台有すること
- 飛行時間型質量分析装置に送液するためのスプリット機能を有すること
- 最大流量が 4mL/min 以上、流量精度は流量 0.05~4.00 mL/min にて再現性 0.05% RSD または±0.04 min SD 以内であること
- 送液ポンプの耐圧は流量 0.05~3.00mL/min において 70MPa 以上であること
- 送液ポンプのプランジャーシールは順相系溶媒（ヘキサン、クロロホルムなど）と逆相系溶媒（水、メタノールなど）に耐える材質であること
- 設定した圧力を超えた場合に自動停止する機能を備えていること

(3) オートサンプラー

- 試料容器容量 2mL のバイアル瓶が 180 本以上設置可能なオートサンプラーを備えていること
- 試料注入量は 0.1~100 μ L まで設定できること
- ニードル内壁、ニードル外壁ともにサンプル測定ごとに洗浄できること
- プレロード機能を装備していること

(4) 分離カラム

① 分離カラムの仕様

- 低炭素原料油測定用として、Inert Sustain C18 HP であること

② カラムオーブン

- カラムオーブンの温度制御は 4°C~80°C まで設定可能であること
- オーブン内の温度は 40°C の設定に対して±0.1°C 以内で制御可能であること

- 温調方式は空気循環式であること
 - カラムサイズφ4.6mm、長さ30cmのカラムが3本以上収納可能であること
(Inert Sustain C18 HPはφ2.1、長さ10cm)
- (5) フォトダイオードアレイ型紫外可視吸光度検出器 (PDA)
- 波長は190～900nmまで測定可能であること
 - バンド幅は高分解～高感度まで、3種類以上可変であること
 - 検出セルの温調機能を有すること
 - 検出セルの耐圧は3.5MPa以上であること
 - フォトダイオードのチャンネル数は1,024ch以上であること
- (6) 装置制御及びデータ処理用パソコン
- ① パソコン本体
- デスクトップもしくはノート形式であること
 - OSはWindows10 Pro64ビットまたはWindows11 Pro64ビットで、日本語版であること
 - CPUはIntel®Core™ i7以上であること
 - メモリは8GB以上であること
 - 記憶領域は1TB SSD以上であること
 - DVD+/-RWドライブを有していること
 - ディスプレイサイズがデスクトップの場合は23インチ以上、ノートの場合は13インチ以上であること
 - MS Office 2021(ワード、エクセル、パワーポイント)をインストール済みであること
- ② 装置制御
- 移動相送液ポンプの流量が0.001～4.0mL/minの範囲で設定可能なこと
 - カラムオープンの温度条件が4℃～80℃の範囲で設定可能なこと
 - PDA検出器のセル温度を設定できること
 - 後述する飛行時間型質量分析装置におけるデータ取得を手動操作、外部信号などで同期させること
- ③ データ処理
- PDAは3波長以上の複数測定画面を表示できること
 - PDA使用時は2次元、3次元クロマトの表示が測定中に可能であること
 - PDA使用時は最大吸光度でのUVクロマトが測定中に表示できること
- (7) HPLC解析ソフトウェア
- 現在、弊センターが保有している液体クロマトグラフとのデータ互換性の観点から、ソフトウェアは日本分光(株)製の「Chrom NAV Ver2」であることが望ましい
※仕様を満たしていれば異なるソフトウェアでも構わない
 - クロマトデータをExcel、CSV形式のデータに変換できること

2. 2. 2 飛行時間型質量分析装置

以下の各部で構成される。

- (1) 液体クロマトグラフと飛行時間型質量分析装置の連結部 1式
- (2) イオン化部 1式
- (3) 質量分析部 1式
- (4) 窒素ガス発生装置 1式
- (5) 装置制御及びデータ処理用パソコン 1式

以下に各部の仕様を示す。

(1) 液体クロマトグラフと飛行時間型質量分析装置の連結部

- 材質は PEEK 製とすること
- メンテナンス性を考慮し、液体クロマトグラフと飛行時間型質量分析装置の連結は、弊センター職員でも作業できる仕様とすること

(2) イオン化部

- エレクトロスプレーイオン化(ESI)、大気圧化学イオン化 (APCI) に対応し、幅広い分子に適用できること
- ESI の対応流量範囲は 5~3000 μ L/min で、液体クロマトグラフの流速にもそのまま対応できること
- 汚れ対策として、強制排気機構が搭載された排気筒を有し、安定的感度を維持しやすい構造であること
- 質量分析部（真空部）に不揮発塩などの汚染物質が侵入するのを防ぐ機能を有すること

(3) 質量分析部

- 選択能力の高い四重極型 (Q) と精密質量情報が取得可能な飛行時間型 (TOF) を連結した QTOF 型質量分析装置であること
- プリカーサーイオン選択範囲が m/z 5 以上であり、低質量側にも対応可能であること
- コリジョンセル (Q2) 部においては加速機能を有し、イオン通過速度を上げることでイオンコンタミネーションを回避できること
- キャリブレーション・デリバリーシステムを備え、測定中に自動で外部補正にて質量校正できること
- 衝突誘起解離 (CID) だけでなくエネルギー変更可能な電子励起解離 (EAD) によるイオン断片化が可能であること
- 高感度定量にも対応していること。あらゆる対象に対し、MSMS スペクトルを高感度取得する機能を有すること
- 外部標準法で 12 時間の LC/MS 取得時間において 2ppm RMS 以下の質量精度を有すること
- 測定モードは、データ依存型測定法 (DDA)、データ非依存型測定法 (DIA)、高分解能定量分析などであること
- スキャン速度が最大 130 Hz 以上であること
- 検出器の分解能を維持したまま、高速データ取得が可能であること

(4) 窒素ガス発生装置

- 質量分析部に十分な窒素ガスを供給できること
- 窒素ガス発生量は最大 20L/min 以上であること

(5) 装置制御及びデータ処理用パソコン

① パソコン本体

- デスクトップもしくはノート形式であること
- OS は Windows10 Pro64 ビットまたは Windows11 Pro64 ビットで、日本語もしくは英語版であること
- CPU は Intel®Core™ i7 以上であること
- メモリは 8GB 以上であること
- 記憶領域は 1TB SSD 以上であること
- DVD+/-RW ドライブを有していること

- ディスプレイサイズがデスクトップの場合は 23 インチ以上、ノートの場合は 13 インチ以上であること
- MS Office 2021(ワード、エクセル、パワーポイント)をインストール済みであること
- ② 装置制御
 - 質量分析部を制御できること
 - プリカーサーイオン選択範囲が m/z 5 から 2250 の範囲で設定可能なこと
 - 対応流量範囲が 5~3000 μ L/min の範囲で設定可能なこと
 - 液体クロマトグラフとのデータ取得を手動操作、外部信号などと連動させること
- ③ データ処理ソフトウェア
 - データの取得、データの定量/定性解析、レポート作成まで行う完全統合型のソフトウェアが装備されていること
 - 汎用的な分析メソッドを作成すること
 - 2. 2. 3 で述べる低炭素原料用の特殊データ解析が可能であり、基本的な分析メソッドを作成できること
 - データを Excel、CSV 形式に変換できること

2. 2. 3 低炭素原料油用のデータ解析ツール

2. 2. 2③のソフトウェアで低炭素原料油のデータ解析を行うため、以下のツールで構成される。

- (1) 低炭素原料油に含まれる有機成分からの特定成分・情報抽出および解析
- (2) 低炭素原料油の分析メソッド作成 ※装置導入後、別途、実施予定

以下に各部の仕様を示す。

- (1) 低炭素原料油に含まれる多数の有機成分からの特定成分・情報抽出および解析
 - 弊センターの要望する低炭素原料油解析に対応すること
 - ① フィルター機能により特定成分（例、含酸素化合物、含塩素化合物など）、特定官能基（例、カルボン酸、エステル、フラン骨格など）などを抽出すること
 - ② 低炭素原料油の複数サンプルを比較し、各サンプルの差分解析すること
 - ③ 低炭素原料油の複数サンプルを比較し、各サンプルの特定成分などを多変量解析すること
 - ④ ケンドリックマスディフェクト（KMD）解析ができること
 - 任意の項目を X 軸、Y 軸に設定し図示すること
 - クロマトデータを Excel、CSV 形式のデータに変換できること
 - データの取得、データの定量/定性解析、レポート作成まで行う完全統合型のソフトウェアが装備されていること
- (2) 低炭素原料の分析メソッド
 - 2. 1(1)記載の少なくとも 2 種類以上の低炭素原料に対して、分析メソッドを作成すること
 - 各成分存在量上位 1000 の成分に対してユーザーライブラリを作成すること

2. 3 安全対策

(1) 液体クロマトグラフ

- 移動相ポンプ、送液ポンプ、オートサンプラー、カラムオーブン、検出器には有機溶媒の漏洩センサーが装備されており、センサーが漏洩を感知した時点でポンプの送液を停止する安全機能を有していること

- (2) 飛行時間型質量分析装置
 - 装置温度異常、装置内圧力変動、排気圧異常などのセンサーが装備されており、制御パソコンへの表示などの機能を有していること
- (3) 地震時などの転倒防止、落下防止策をとること
 - ※固定工事は弊センターにて行う予定
- (4) 各パーツをつなぐ溶剤の流れる配管の材質は移動相溶媒容器部及び廃液などの配管、飛行時間型質量分析装置の測定に対し影響を与える箇所を除いてステンレス製の配管を基本とすること
- (5) 液体クロマトグラフ、飛行時間型質量分析装置、窒素発生装置を除いた全てのパーツが幅 40 cm、奥行 70cm の実験台上に設置可能なこと

2. 4 その他

- (1) ユーティリティ ※必要なユーティリティを明記すること
 - ① 液体クロマトグラフ 1式
 - 使用電力：電圧 100V、最大消費電力は 1,500VA 以下
 - コンセントプラグは 3 芯式であること
 - 2 系統以上（制御 PC、装置本体）
 - ② 飛行時間型質量分析装置 1式
 - 使用電力：電圧 100V、最大消費電力は 1,500VA 以下
 - コンセントプラグは 3 芯式であること
 - 2 系統以上（制御 PC、解析 PC）
 - 電圧 200V、最大消費量は未定
 - 記載コンセントプラグは 3 芯式であること
 - 2 系統以上（MS 本体、ロータリポンプ）
 - ガス：窒素ボンベ
 - 窒素ボンベの純度は 99.9995%以上
 - 窒素発生装置（2. 2. 2 (4)参照）
 - 電圧 200V、15A（NEMA 規格 6-15R）1 系統
 - ③ 装置制御及びデータ処理用パソコン 2 台(②の 100V と重複)
 - 使用電力：電圧 100V、最大消費電力は 1,500VA 以下
 - コンセントプラグは 3 芯式であること
 - ※必要なユーティリティ工事は弊センターで行う予定
- (2) 日本国内にサポート体制を有しており、迅速な修理点検が可能であること。また、故障時には速やかな対応が可能であること
- (3) 本仕様書は、予備品をその仕様範囲に含まないことから、弊センター発注後、3 ヶ月以内に納品可能であること

3. 納入先

〒136-0082

東京都江東区新木場二丁目 3 番 8 号 三井リンクラボ新木場 1 (2 階)

一般財団法人カーボンニュートラル燃料技術センター

製造プロセス技術部 ペトロリオミクス技術研究室

4. 納期

2024年9月30日まで

5. 売主の業務範囲

装置納入業者（以下、売主という）は以下の業務を行う。

- (1) 装置仕様書の作成
- (2) 装置の設計、製作、現地搬入据付等工事一式
- (3) 試運転調整、取扱い説明
- (4) 性能試験成績書、保守点検要領書、マニュアルの作成
- (5) 納入設置に伴い発生する廃材の処分

6. 提出書類および記載事項

- (1) メーカー名、機種名を記載した見積書
- (2) （ライセンス形式のソフトがある場合は、ライセンスは事業期間 2026年3月末までとすること）
- (3) 装置の仕様書および設置要領書
- (4) 上記5の作業にかかる全ての費用（設置費用等も含めること）

7. 一般事項

7. 1 適用法規、基準

本業務遂行にあたっては、設計、製作、施工、運転等において、関連する法規、基準、規格等を適用するものとし、売主は本件工事に係わる法的手続きが必要な場合には、適用法規等に規定された手続きを行うものとする。

7. 2 検収条件

- (1) 検収は以下の全ての事項が満足していることを、弊センターが確認したときをもって完了したものとする。
 - ① 本仕様書に記載した仕様が全て満足されていること
 - ② 弊センターの定めた方法により試運転を行い、本仕様書に記載された性能が全て満足されていること
 - ③ 下記の書類が提出されていること
 - ・装置仕様書
 - ・取り扱い説明書、測定簡易マニュアル
 - ・検収成績書
 - ・その他弊センターが必要とする書類等

- (2) 異常時の処置

検収により異常が発見された場合、その原因が売主の設計、製作、施工等に起因している場合は、速やかに売主はその責任において弊センターの承認を受け、無償で必要な変更、改造、取替え等の処置を講ずるものとし、さらに弊センターの検収を受けなければならない。

7. 3 保証

売主は、本装置の納入後1年以内に故障が発生し、その原因が装置の品質、性能等に何らかの異常を発見した場合は、速やかに必要な処置を無償で講ずるものとし、さらに弊センターの検収を受けなければならない。

7. 4 その他

- (1) 本仕様書に定めない事項は、別途協議のうえ定めるものとする。
- (2) 納期の遅延が売主の責任範囲内において明らかになった場合は、速やかに弊センターに連絡し、別途協議するものとする。
- (3) 設置作業では電源は無償支給するが、それ以外の用役は売主で用意する。
- (4) 売主は、設置作業を開始する7日前迄に所定の「作業申請書」に必要事項を記入して提出する。
- (5) 納入設置に伴い発生する廃材は売主が責任をもって処分すること

以上