

Załącznik nr 1: Opis Przedmiotu Zamówienia do postępowania numer WF/12/ZP/2022

„Wykonanie segmentowych pomiarów chemicznych pozwalających na określenie składu chemicznego zapachu wydzielanego przez barczatkę sosnowkę (*Dendrolimus pini*, L.) oraz grzyby patogenne z rodzin *Fusarium*, *Rhizoctonia* i *Phytophthora* dla Wydziału Fizyki Politechniki Warszawskiej”

(WF/12/ZP/2022)

Wymagania i specyfikacja sprzętu na jakim wykonywany będzie pomiar:

Seria segmentowych pomiarów zapachów wydzielanego przez barczatkę sosnowkę (*Dendrolimus pini*, L.) oraz grzyby patogenne z rodzin *Fusarium*, *Rhizoctonia* i *Phytophthora* dla Zamawiającego zostanie wykonana w dwuetapowym cyklu doświadczeń.

ETAP 1: Pierwszy etap polegać będzie na opracowaniu metody powtarzalnego pozyskiwania próbek zapachów z wykorzystaniem techniki mikroekstrakcji do fazy stałej (SPME). Zamawiający wymaga, aby zastosowane zostały tu zostały różne włókna aktywne, różniące się polarnością oraz powinowactwem chemicznym, takie jak:

- polidimetylosiloksan (PDMS) – włókno jednoskładnikowe o umiarkowanej polarności
- polidimetylosiloksan/diwinylobenzen (PDMS/DVB) – włókno dwuskładnikowe o szerokim spektrum polarności obejmującą możliwość pozyskania składników zapachowych niepolarnych i średnio polarnych
- poliakryloamid (PAA) – włókno polimerowe jednoskładnikowe dedykowane do analizy składników polarnych

Opracowanie efektywnej metody poboru składników zapachu obejmie m.in.: kondycjonowanie włókien, optymalizację czasu poboru, warunków poboru, czas desorpcji w iniektorze spektrometru mas oraz powtarzalność i selektywność.

ETAP DRUGI: Drugi etap polegać będzie na opracowaniu metody analizy chemicznej z detekcją online w spektrometrze mas typu pułapka jonowa sprzężonym z kapilarnym chromatografem gazowym (GC/EI-IT/MS) firmy Thermo Scientific (model Trace 1300 ITQ700) wyposażonym w najnowszą bibliotekę referencyjnych widm masowych Willey 11. Parametry wyjściowe pracy tego urządzenia zostaną dobrane w procesie optymalizacji metody analitycznej przez analogię do optymalizacji zastosowanej we wcześniejszych badaniach wykonanych dla Zlecającego z użyciem kwadrupolowego spektrometru mas (model HP 6890/5973GC/MSD). Pomiary z wykorzystaniem spektrometru mas typu pułapka jonowa pozwolą na zwiększenie potencjału identyfikacji składników zapachowych. Dodatkowo, wiarygodność procesu identyfikacji poszczególnych składników zapachowych materiału biologicznego powinna zostać wzmocniona wykorzystaniem obliczeń indeksów Kovatsa identyfikowanych związków. Opracowanie efektywnej metody analizy składników zapachu obejmie m.in.: stworzenie metody podziału składników zapachowych na drodze kapilarnej chromatografii gazowej, optymalizację rozdziału, minimalizację czasu analizy oraz interpretację widm masowych typu EI.

Wymagania dotyczące opracowania i sposobu prezentacji wyników:

Na podstawie interpretacji otrzymanych wyników, w tym widm wraz z opisaną strukturą chemiczną badanego związku oraz indeksem Kovatsa, opracowany zostanie katalog składników zapachu barczatki sosnowki (*Dendrolimus pini*, L.), jej gąsienic oraz grzybów z rodziny *Fusarium*, *Rhizoctonia* i *Phytophthora*.

RAPORT: Wyniki wraz z interpretacją, w tym widma z opisaną strukturą chemiczną badanego związku oraz indeksem Kovatsa wraz z opracowanym katalogiem składników zapachu barczatki sosnowki, jej gąsienic oraz grzybów z rodziny *Fusarium*, *Rhizoctonia* i *Phytophthora* zostaną przedstawione w formie pisemnego raportu końcowego.

Dokładne określenie zakresu pomiarów:

W trakcie pomiarów zostanie opracowana:

- metoda pozyskiwania próbek zapachu barczatki sosnowki (*Dendrolimus pini*, L.), jej gąsienic oraz grzybów z rodziny *Fusarium*, *Rhizoctonia* i *Phytophthora* w warunkach laboratoryjnych (etap I). Wykorzystane tu będą aktywne włókna mikroekstrakcji do fazy stałej SPME, różniące się polarnością oraz powinowactwem chemicznym, w tym: polidimetylosiloksan (PDMS) – włókno jednoskładnikowe o umiarkowanej polarnośći;

polidimetylosiloksan/diwinylobenzen (PDMS/DVB) – włókno dwuskładnikowe o szerokim spektrum polarności obejmującą możliwość pozyskania składników zapachowych niepolarnych i średnio polarnych oraz poliakryloamid (PAA) – włókno polimerowe jednoskładnikowe dedykowane do analizy składników polarnych.

Zakres prac w tym etapie obejmie m.in.: kondycjonowanie włókien, optymalizację czasu poboru, warunków poboru, czas desorpcji w iniektorze spektrometru mas oraz powtarzalność i selektywność.

- metoda analizy chemicznej z detekcją online z użyciem spektrometru mas typu pułapka jonowa sprzężonego z kapilarnym chromatografem gazowym (GC/EI-IT/MS) firmy Thermo Scientific (model i parametry robocze zostały wymienione w sekcji Wymagania i specyfikacja sprzętu na jakim wykonywany będzie pomiar).

Wiarygodność procesu identyfikacji poszczególnych składników zapachowych materiału biologicznego będzie wzmocniona wykorzystaniem pakietu profesjonalnych bibliotek widm masowych (biblioteka Willey 11), w którą wyposażony jest spektrometr mas Wykonawcy oraz obliczeniem indeksów Kovatsa.

Opracowanie efektywnej metody analizy składników zapachu obejmie m.in.: stworzenie metody podziału składników zapachowych na drodze chromatografii gazowej, optymalizację rozdziału, minimalizację czasu analizy oraz interpretację widm masowych typu EI.

Wykonawca wykona łącznie dwa bloki pomiarowe:

- Cykl pomiarowy identyfikacji składników zapachowych wydzielanych przez gąsienice barczatki sosnowki (*Dendrolimus pini*, L.)
- Cykl pomiarowy zapachów emitowanych przez grzyby z rodziny *Fusarium*, *Rhizoctonia* i *Phytophthora*

Każdy z powyższych bloków pomiarowych składać się będzie z następujących etapów:

- przygotowanie próbników SPME o różnych włóknach aktywnych do poboru substancji lotnej/sygnału chemicznego z dostarczonych próbek biologicznych (patrz wyżej)
- kalibracji/pomiaru wstępnego danej substancji lotnej/sygnału chemicznego
- pomiaru właściwego, tj. wykonanie serii analiz chemicznych, zarówno jakościowych oraz ilościowych, pozwalających na określenie składu chemicznego zapachu
- identyfikacji rozdzielonych sygnałów
- opisu i interpretacji wyniku w oparciu o profesjonalne bazy wzorcowych widm masowych oraz obliczenia indeksów Kovatsa

Wynikiem końcowym wyżej opisanych prac będzie katalog zidentyfikowanych składników zapachu, które zostaną przekazane Zamawiającemu w formie pisemnej.