

Příloha č. 3 – technická specifikace

Zadání výběrového řízení pro FTIR (Infračervený FT-IR spektrometr)

Požadujeme nákup **Infračerveného FT-IR spektrometru s ATR nástavcem a kombinovaného s Ramanovskou spektroskopií (Ramanovým modulem vkládaným do vzorkového prostoru) a doplněného o databázi spekter pro analýzy mnoha typů vzorků, např. kapalin, pevných látek, prášků, polotuhých látek, plynů a past, polymerů, tenkých vrstev apod.**

Toto zařízení nám umožní chemické analýzy připravených vzorků, budeme moci analyzovat chemické složení mnoha typů vzorků, připravovaných v rámci projektu, např. kapalin, pevných látek, prášků, polotuhých látek, plynů a past, polymerů, tenkých vrstev apod. bez jejich poškození.

Cena je stanovena na částku 4 150 000,- Kč bez DPH, tedy 5 021 500,- Kč s DPH.

Popis požadovaného přístroje a Technické parametry:

Infračervený FT-IR spektrometr s ATR nástavcem a Ramanovým modulem vkládaným do vzorkového prostoru

Infračervený FT-IR spektrometr:

Vyžadujeme, aby přístroj obsahoval a umožňoval:

- detektor typu DLaTGS
- Ge/KBr dělič paprsků; CaF₂ dělič paprsků; Solid Substrate dělič paprsků
- Automatizovaná výměna děličů paprsků a softwarové přepínání mezi detektory (zabudování až tří děličů paprsků ve spektrometru a systém automatické výměny děličů paprsků bez manuálního zásahu uživatele (pomocí software))
- možnost až 4 implementovaných detektorů do základního spektrometru (nikoliv v externích modulech)
- systém automatického přepínání detektorů bez manuálního zásahu uživatele a přepínání mezi zdroji záření bez manuálního zásahu uživatele (pomocí software)
- vzduchem chlazený vysoko-intenzitní zdroj infračerveného záření
- halogen-wolframový zdroj záření
- pozlacená optika zrcadel spektrometru
- NeHe referenční laser pro zjišťování pozice pohyblivého zrcadla
- motorizovaná irisová apertura řízená softwarem
- spektrální rozsah 7800-100 cm⁻¹; 700-100 cm⁻¹ (vzdálená infračervená oblast); 7800-350 cm⁻¹ (střední infračervená oblast); spektrální rozlišení 0,09 cm⁻¹ (boxcar apodizace)
- poměr signálu k šumu (S/N) > než 55000:1 (pro 1-minutové měření, p-t-p; při spektrálním rozlišení 4 cm⁻¹)
- vlnočtová přesnost lepší než 0,01 cm⁻¹ (při 2000 cm⁻¹)
- uživatelsky volitelná rychlost pohybu pohyblivého zrcadla v rozsahu od 0,158 cm·s⁻¹ do 6,28 cm·s⁻¹ (počet volitelných rychlostí 15)
- rychlost měření 1 scan za sekundu při standardním nastavení 4 cm⁻¹ s možností náhledu na spektrum v reálném čase
- rychlost měření 65 spekter za sekundu při rozlišení 16 cm⁻¹, nebo 95 scanů za sekundu při rozlišení 32 cm⁻¹
- Michelsonův interferometr s mechanickým pohybem
- automatické elektronické nastavení spektrometru Autotune – seřizování spektrometru před vlastním měřením (např. korekce na teplotní roztažnost materiálu děliče paprsků – samostatná hardwarová elektronická a softwarová funkce)
- elektronické dynamické nastavování optiky Dynamic Alignment – nepřetržitá elektronická dynamická optimalizace optické lavice (tj. optimalizace systému při každém scanu, tzn., že optická lavice FTIR spektrometru je optimalizována na maximální energetickou propustnost záření každou sekundu)
- systém jednodotekového ovládání – hardwarová tlačítka pro volbu měření ve všech měřících modulech (stisknutí tlačítka znamená změnu nastavení hardware spektrometru, popř. i včetně automatické výměny děliče paprsků)

- zatěsněná konstrukce krytu spektrometru s možností profukování přístroje suchým inertním plynem nebo suchým vzduchem
- možnost softwarově řízeného automatizované vkládání těsnících závěrek (klatek) do vzorkového prostoru pro zachování inertní atmosféry spektrometru při manipulaci se vzorkem
- vzorkový prostor spektrometru umožňuje: automatickou rekognoskaci různých měřících nástavců vč. Automatického nastavení experimentálních parametrů; použití dlouhocestných plynových kyvet (optická dráha min. 5 cm, max. 200 metrů)
- interní validační zařízení s certifikovanými standardy
- externí výstupy/vstupy infračerveného záření na levé i na pravé straně spektrometru pro možnost budoucího doplnění spektrometru
- anglické a české manuály
- možnost validace podle ČSN EN ISO/IEC 17025:2005
- komunikační rozhraní mezi přístrojem a PC je řešeno pomocí kabelu využívající USB protokol
- hmotnost spektrometru max. 60 kg (kvůli nosnosti stolů v laboratoři)

ATR nástavec s jedno-odrazovým diamantovým krystalem a s vlastním detektorem permanentně zabudovaný v dodaném spektrometru

- ATR nástavec umožňující měření ve spektrálním rozsahu minimálně $4000 - 100 \text{ cm}^{-1}$ (v závislosti na použitém děliči paprsků)
- ATR nástavec neomezuje standardní vzorkový prostor spektrometru
- přepínání na měření pomocí ATR nástavce je softwarové nebo pomocí hardwarového tlačítka na těle spektrometru (bez dalšího manuálního zásahu obsluhy)
- databáze minimálně 19500 ATR FT-IR spekter anorganických, organických sloučenin a polymerů

FT – Ramanův modul vkládaný do vzorkového prostoru

- Z důvodu nároků na prostor v laboratoři musí být měření FT-Ramanových spekter realizováno pomocí nástavce umístěného do vzorkového prostoru spektrometru (externí FT-Ramanův spektrometr nebo externí modul není přípustný z důvodu nedostatku prostoru). Maximální hmotnost modulu: 10 kg
- InGaAs detektor
- Excitační laser 1064 nm. Je požadován softwarově nastavitelný výkon tohoto laseru na vzorku minimálně v rozsahu 50 – 450 mW
- Je požadován spektrální rozsah minimálně $5000 - 100 \text{ cm}^{-1}$ pouze Stokesovy linie
- Maximální velikost stopy fokusovaného laserového paprsku na vzorku: 100 μm a je požadována možnost defokusace stopy laserového paprsku na vzorku až na 1 mm pro snížení zátěže citlivých vzorků. Defokusace musí být iniciována pouze softwarovým příkazem
- Modul musí umožňovat měření ve skleněných nádobkách nebo v mikrotitračních destičkách
- Modul musí obsahovat motorizovaný X-Y-Z mikroskopický stolek umožňující posun s minimálním krokem maximálně 10 mikrometrů
- Modul musí umožňovat přesun na jiné měřené místo vzorku softwarovým příkazem, a to včetně autofokusu na vzorku
- USB kamera musí být součástí nástavce
- polystyrenový standard; sada na přípravu vzorků
- databáze minimálně 3200 Ramanových spekter anorganických, organických sloučenin a polymerů.

Požadujeme takovou sestavu, aby existovala možnost budoucího doplnění spektrometru o další případné doplňky a vybavení:

- o GC-IR modul včetně vyhřívané transferline a lightpipe s MCT-A detektorem (s minimálním spektrálním rozsahem $11700 - 600 \text{ cm}^{-1}$)
- infračervený mikroskop měřící ve střední infračervené oblasti (popř. i ve vzdálené infračervené oblasti)
- TGA-IR interface
- spojení infračervené spektroskopie s reometrem
- infračervený polarizátor se softwarovým řízením (včetně nastavování rotace polarizátoru)
- externí vstupy IČ záření z levé i pravé strany spektrometru
- externí PEM modul umožňující polarizační modulaci

- rozšíření spektrálního rozsahu do viditelné oblasti (možnost minimálního měřicího rozsahu od 50 do 27000 cm^{-1})
- rozšíření na pokročilé měřicí spektroskopické techniky Step Scan techniky (AM, PM, TRS, Multiple Modulation, fotoakustická step-scan spektroskopie apod.)

Kompletní ovládací, diagnostický a validační software (ovládání systému pomocí grafických ikon a horkých kláves), softwarové vybavení umožňující:

- spektrální matematiku
- práci s knihovnami spekter
- pokročilá ATR korekce – korekce y-ové, tak i x-ové osy ATR spektra (nezbytná funkce pro srovnávání infračervených spekter naměřených ATR technikou se spektry naměřenými standardními transmisními technikami) – vyžaduje nastavení následujících parametrů: materiál krystalu, počet odrazů, úhel odrazu a indexu lomu měřeného materiálu
- různými matematickými funkcemi ověření shody naměřeného spektra vůči jednomu či více spektrům standard (včetně možnosti zvýšení citlivosti ověření shody pro vysoce podobná spektra)
- separaci překrývajících se spektrálních pásů
- interpretaci infračervených spekter
- diagnostickou kontrolu zdroje záření, laseru, napájení, detektoru a elektroniky spektrometru, nastavení termínů preventivní údržby atd.
- automatizovanou kontrolu funkčnosti zařízení (navíc uživatel musí mít možnost provádět samostatně kontrolní měření na dodaných certifikovaných standardech)
- zabudovaný diagnostický software pro kontrolu zdroje záření, laseru, napájení, detektoru a elektroniky spektrometru, dále pro PQ, nastavení termínů preventivní údržby atd.
- funkce vyhledávání ve spektrálních knihovnách (včetně multikomponentních možností)
- příkladové knihovny s min. 1400 infračervenými a Ramanovými spektry
- tvorba protokolů
- příslušenství a software pro validaci systému (přístroje) dle normy ASTM 1421-99 (externí validace) – včetně IQ/OQ
- možnost externí validace spektrometru podle ČSN EN ISO/IEC 17025
- certifikace výrobce a dodavatele dle normy ISO 9001

Program pro kvantitativní a kvalitativní analýzu (Lambert-Beer, CLS, ...) + chemometrický modul (metody PLS, DA, ...) umožňující tvorbu multivariačních chemometrických algoritmů, tj. metod na stanovení fyzikálních a chemických parametrů u matričně podobných vzorků. Kompletní manuály v českém jazyce

Program pro tvorbu automatizovaných postupů (měření, vyhodnocování, tvorba protokolů, export do Wordu, Excelu apod., matematické a logické rozhodovací operace)

Specializovaný program na správu všech spektrálních souborů na PC, tvorba virtuálních knihoven z naměřených spektrálních dat, procesní trasa (jakákoliv úprava spekter je vždy vratná), atd. Identifikace čistých látek a směsí (identifikace vícesložkových směsí) – multikomponentní vyhledávání v knihovnách umožňující analýzu směsí v jednom kroku– až 4 složky, multikomponentní vyhledávání minoritních látek ve směsných vzorcích umožňující předem ručně definovat majoritní složku tzv. kontaminant search – až 4 složky. Využívání identických souborů (knihoven spekter) pro základní spektroskopický i specializovaný program s funkcemi uvedenými výše

Knihovny (digitální databáze) transmisních infračervených spekter organických a anorganických látek (minimálně 10 000 spekter)

Měřicí stanice - počítač s příslušenstvím a operačním systémem.

- Měřicí stanice - PC s dostatečným výkonem a pamětí pro požadované SW, LCD displejem s úhlopříčkou 22-24", systémovým SSD diskem, 2x2TB disky v RAID 1 pro dlouhodobé ukládání dat, USB konektorem, kabelovou myší a klávesnicí. Dodáno s operačním systémem kompatibilním s prostředím univerzity, dodávaným spektrometrem a programy.