### Příloha č. 1 - technická specifikace plnění

**Automatizovaný systém pro přípravu a komplexní charakterizaci suspenzí a emulzí**

Požadovaný systém jako celek musí umožňovat provádění experimentů pokrývajících krystalizaci, srážení, tvorbu emulzí a polymeraci. Navíc systém musí umožňovat provádění těchto experimentů za různých teplot a intenzity míchání, umožňovat postupné dávkování reaktantů do systému. Vzhledem k tepelnému zabarvení procesů systém navíc musí umožňovat měření reakčního tepla pro výše uvedené procesy. Vytvořené kapky nebo částice budou následně charakterizovány pomocí několika metod, a to in-situ a on- line, tak aby bylo možné získat časový vývoj velikosti částic, změny jejich morfologie a tvaru, a koncentraci reaktantů pomocí Ramanovy spektroskopie. Navíc je potřebné, aby systém dokázal zpracovávat naměřená data a využívat získané hodnoty (např. velikosti části, jejich tvar, koncentraci jednoho z reaktantů) pro řízení procesů (např. řízení otáček, teploty, rychlosti dávkování atd.). Systém musí současně umožňovat ukládání dat všemi analytickými metodami tak, aby bylo možné porovnávat jednotlivá data v řídicím programu.

*Systém splňuje všechny požadavky uvedené v předcházejícím odstavci. Skládá se z laboratorních reaktorů, sondy pro měření distribuce, velikosti a počtu částic, sondy pro charakterizaci částic na základě analýzy obrazu a sondy pro sledování změn morfologie a koncentrace reaktantů pomocí Ramanovy spektroskopie v reálném čase. Software jednotlivých sond komunikuje s řídícím softwarem reaktorů iControl, naměřená data mohou být využita pro řízení procesu. Systém umožňuje ukládání dat naměřených jednotlivými analytickými metodami v řídícím programu pro jejich porovnání.*

***Systém je dále vybaven kalorimetrickým nástavcem HFCal pro měření tepla spotřebovaného nebo uvolněného chemickou reakcí (Dokument 3)*.**

Níže jsou uvedeny minimální technické požadavky pro jednotlivé části systému. Tyto požadavky jsou nastaveny tak aby zabezpečovaly plnou funkčnost systému jako celku a jako i propojení jednotlivých jeho částí.

### Minimální technické požadavky na reaktorový systém:

* Systém musí obsahovat minimálně dvě samostatně funkční míchané nádoby osazené nezávislým mícháním, topením/chlazením a systémem dávkování organických i anorganických kapalných reaktantů.

*Systém EasyMax Advanced 402 obsahuje dvě pozice pro dva samostatné míchané nádoby s nezávislým mícháním, topením/chlazením (Dokument 1/str. 1) a systémem dávkování organických i anorganických kapalných reaktantů, čerpadlo SP-50 (Dokument 12/strana 90).*

* Systém musí být schopen pracovat v tepelném rozsahu -20C až +90C. Chlazení systému musí být samostatně funkční. V opačném případě bude součástí dodávky i chladící jednotka.

*Systém pracuje v teplotním rozsahu -40°C až +180°C (Dokument 1/str. 2). Chlazení systému je samostatně funkční, pomocí samostatného cirkulačního kryostatu WCL-22 (Dokument 10), zajišťuje funkci v plném rozsahu teplot.*

* Systém musí být schopen nezávislého dávkování kapalných reaktantů do obou reaktorů v rozsahu 0.5 až 150 mL/min.

*Dávkovací čerpadla dávkují rychlostí v rozsahu 0,1 – 187,5 mL/min do obou reaktorů (Dokument 11, strana 19).*

* Systém musí umožňovat nastavení otáček v rozsahu 50 až 1000 RPM, a to samostatně v každé reakční nádobě.

*Systém umožňuje nezávislé nastavení obou míchadel v rozsahu 50 až 1000 rpm (Dokument 1/strana 2).*

* Motor míchadla spolu s hřídelí musí být umístěn z vrchu nádoby (overhead). Reaktory musí být přednostně osazeny lopatkovým míchadlem (pitched blade) s průměrem v rozsahu 20 až 30 mm a současně umožňovat použití dalších typů míchadel (např. pitched blade, Rushton impeller, Anchor impeller).

*Motor míchadla je umístěn z vrchu nádoby. Standardně je vybaven lopatkovým míchadlem o průměru 25 mm (Dokument 12/strana 80). Míchadlo je určeno pro míchání v reaktorech 100 a 400 mL. Umožňuje také používání dalších typů míchadel (Dokument 1/strana 2).*

* Víko nádob musí umožňovat zasunutí alespoň dvou sond pro měření velikosti částic, jejich tvaru a morfologie, a složení reakční směsi.

*Víka reaktorů pro 100 mL i 400 mL reaktory mají 6 portů ve skleněné i PTFE verzi (Dokument 12/strany 40, 44, 60 a 63).*

* Řízení procesních veličin (otáčky míchadla, teplota a teplotní profil v čase, rychlost dávkování) musí být zabezpečeno pomocí řídícího programu spolu s vykreslením časového profilu procesních veličin. Navíc řídící program musí umožňovat použití informace z externí sondy (např. velikosti části, tvarového faktoru, koncentrace reaktantů) pro řízení procesních veličin.

*Řídicí program iControl zajišťuje řízení procesních veličin pomocí řídícího programu, který rovněž vykresluje profily časových veličin (Dokument 2/strana 2). Zpracovává rovněž informace z externích sond, které pomocí trendů využívá k řízení procesních veličin (Dokument 2/strana 2).*

* Sběr dat ze systému musí být minimálně jednou za 10 s.

*Všechna data se ukládají jednou za 2 sekundy (Dokument 1/strana 2).*

* Řídící program musí umožňovat vytváření šablon experimentů pro snadné a jednoduché opakování předešlých podmínek (např. rychlost otáček, teplotní profil, rychlost dávkování).

*Řídicí program iControl umožňuje uložení šablon experimentů. V šablonách jsou uloženy podmínky předešlých experimentů, které pak lze pomocí šablon jednoduše opakovat (Dokument 2/strana 2).*

* Řídící program musí pracovat pod programem Windows 10 a musí umožňovat export naměřených dat minimálně do programů Microsoft Word nebo Excel.

*Řídicí program iControl pracuje pod operačním systémem Windows 10 a umožňuje export dat do aplikací Microsoft Word a Excel (Dokument 2/strana 2).*

### Minimální technické požadavky na in-situ on-line sondu pro měření velikosti částic/kapek:

* Sonda může analyzovat velikost částic/kapek pomocí analýzy obrazu nebo pomocí analýzy zpětného odrazu světla.

*Sonda analyzuje velikost a počtu částic/kapek v reálném čase (Dokument 4/strana 1) pomocí analýzy zpětného odrazu světla Focused Beam Reflectance Measurement – FBRM (Dokument 4/strana 2).*

* Sonda musí být vyrobena z chemicky i mechanicky odolného materiálu (nerezová ocel, safír či ekvivalentní).

*Sonda je vyrobena z nerezové oceli C22, okno ze safíru (Dokument 4/strana 2).*

* Sonda musí umožňovat práci v rozsahu teplot -20C až +90C a v rozsahu přetlaků od 0 do 3 bar.

*Sonda při proplachování dusíkem umožňuje měření v rozmezí teplot -80°C až +90°C a tlacích do 3 bar (Dokument 4/strana 2).*

* Vnější průměr sondy nesmí být větší než 15 mm a délka části sondy ponořené do kapaliny musí být minimálně 190 mm.

*Vnější průměr sondy je 14 resp. 9,5 mm, ponorná hloubka je 206 mm (Dokument 4/strana 2 – sonda 14 mm)*

* Sonda musí být schopna měřit velikost částic v širokém rozsahu koncentrací, a to až do 10 hmot.% dispergované fáze.

*Sonda je schopna měřit velikost částic v širokém rozsahu koncentrací do 10% hmotnostních, FBRM technologie umožňuje měření v koncentracích do 70% hmotnostních (Dokument 13/strana 8).*

* Sonda musí být schopna měřit velikost částic v rozsahu minimálně od 1 mikronu do 1 mm.

*Sonda měří částice v rozsahu od 0,5 mikrometru do 2 milimetrů (Dokument 4/strana 2).*

* Program pro řízení a analýzu dat musí umožňovat vykreslování časových trendů změny velikosti částic celé populace popřípadě její části.

*Řídicí program iC FBRM umožňuje vykreslování časových trendů změny velikosti částic celé populace nebo jejích částí (Dokument 5/strana 2).*

* Řídící program musím umožňovat výměnu dat s řídícím programem reaktorového systému pro možnost využití informace o velikosti částic pro řízení procesních veličin reaktorového systému.

*Řídicí program iC FBRM umožňuje výměnu dat s řídicím programem reaktoru iC Control, který využívá informace o velikosti a počtu částic prořízení procesních veličin reaktorového systému (Dokument 5/strana 2).*

* Řídící program musím pracovat pod operačním programem Windows 10 a umožňovat vytváření reportů v programech Microsoft Word nebo Excel.

*Řídicí program iControl pracuje pod operačním systémem Windows 10 a umožňuje export dat do aplikací Microsoft Word a Excel (Dokument 5/strana 2).*

### Minimální technické požadavky na in-situ on-line sondu pro měření tvaru a morfologie částic/kapek:

* Analýza tvaru a morfologie částic/kapek může být založena na analýze obrazu nebo jiné obdobné metodě.

*EasyViewer 100 analyzuje tvar a morfologii části/kapek na základě analýzy obrazu (Dokument 6/strana 1).*

* Sonda musí být vyrobena z chemicky i mechanicky odolného materiálu (nerezová ocel, safír či ekvivalentní).

*Sonda je vyrobena z chemicky i mechanicky odolného materiálu - nerezová ocel C22, safír, zlato (Dokument 6/strana 2).*

* Sonda musí umožňovat práci v rozsahu teplot -20C až +90C a v rozsahu přetlaků od 0 do 3 bar.

*Sonda umožňuje měření v rozsahu teplot -20°C až 135°C v rozmezí přetlaků 0 až 10 bar (Dokument 6/strana 2).*

* Vnější průměr sondy nesmí být větší než 15 mm a délka části sondy ponořené do kapaliny musí být minimálně 190 mm.

*Vnější průměr sondy je 9,5 mm a ponorná hloubka je 199 mm (Dokument 6/strana 2).*

* Sonda musí mýt rozlišení

minimálně 2 mikrony a zobrazovat oblast o ploše minimálně 0,5 mm2.

*Sonda má optické rozlišení > 1,5 mikronu na ploše 1 mm2 (Dokument 6/strana 2).*

* Hloubka zaostření musí být minimálně 150 mikronů do kapaliny.

*Hloubka zaostření ohniska do kapaliny je 0 - 500 mikronů (Dokument 14/strana 35).*

* Frekvence snímání musí být minimálně 20 obrázků za sekundu.

*Frekvence snímání obrázků je 25 obrázků za sekundu (Dokument 14/strana 35).*

* Řídící program musím umožňovat výměnu dat s řídícím programem reaktorového systému pro možnost využití informace o tvaru nebo morfologii částic pro řízení procesních veličin reaktorového systému.

*Řídicí program iC Vision umožňuje výměnu dat s řídicím programem reaktoru iC Control, který využívá informace o tvaru a velikosti částic pro řízení procesních veličin reaktorového systému (Dokument 7/strana 2).*

* Program pro automatickou analýza obrazu musí být součástí řídícího programu sondy.

*Software Image Analysis pro automatickou analýzu obrazu je součástí řídícího programu sondy iC Vision (Cenová nabídka, položka 230, Image Analysis bundle).*

* Řídící program musí pracovat pod operačním programem Windows 10 a umožňovat vytváření reportů v programech Microsoft Word nebo Excel.

*Řídicí program iC Vision pracuje pod operačním systémem Windows 10 a umožňuje export dat do aplikací Microsoft Word a Excel (Dokument 7/strana 2).*

### Minimální technické požadavky na in-situ on-line sondu pro měření složení reakční směsi pomocí Ramanovy spektroskopie:

* Sonda musí umožňovat analýzu složení kapalných vzorků s cílem zjistit koncentraci reaktantů/produktů v průběhu experimentu.

*Sonda umožňuje analýzu složení kapalných vzorků a měření jejich koncentrace v průběhu experimentu na základě Ramanovy spektroskopie (Dokument 8/strana 1).*

* Sonda musí být vyrobena z chemicky i mechanicky odolného materiálu (nerezová ocel, safír či ekvivalentní).

*Sonda je vyrobena z chemicky i mechanicky odolného materiálu – Nerezová ocel C276, safír a zlato (Dokument 8/strana 2).*

* Sonda musí umožňovat práci v rozsahu teplot -20C až +90C a v rozsahu přetlaků od 0 do 3 bar.

*Sonda umožňuje měření v rozsahu teplot -100°C - +300°C v rozsahu přetlaků 0 až 413 bar (Dokument 8/strana 2).*

* Vnější průměr sondy nesmí být větší než 15 mm a délka části ponořené sondy do kapaliny musí být minimálně 190 mm.

*Vnější průměr sondy je 12,7 mm a ponorná hloubka je 260 mm (Dokument 8/strana 2 – ½" Fiber BallProbe).*

* Optický rozsah použité metody musí být od 150 do 3000 1/cm a maximum excitačního příkonu nesmí být vyšší než 400 mW.

*Optický rozsah použité metody je od 100 do 3 200 1/cm a maximální excitačního příkonu je 400 mW, typický < 250 mW (Dokument 8/strana 2).*

* Řídící program musí umožňovat analýzu dat v reálném čase, umožňovat tvorbu profilů a trendů s naměřených dat, umožňovat propojení s řídícím programem reaktorového systému pro možnost využití informace o chemickém složení pro řízení procesních veličin reaktorového systému.

*Řídící program iC Raman 7 umožňuje analýzu dat v reálném čase, umožňuje tvorbu profilů a trendů z naměřených dat, umožňuje propojení s řídícím programem reaktorového systému iC Control pro možnost využití informace o chemickém složení pro řízení procesních veličin reaktorového systému (Dokument 9/strana 2).*

* Řídící program musí pracovat pod operačním programem Windows 10 a umožňovat vytváření reportů v programech Microsoft Word nebo Excel.

*Řídicí program iC Raman 7 pracuje pod operačním systémem Windows 10 a umožňuje export dat do aplikací Microsoft Word a Excel (Dokument 9/strana 2).*

* Součástí dodávky je řídicí a ovládací PC s operačním systémem Windows 10 (64-bit) výkonově a kapacitně uzpůsoben k obsluze dodavatelem nabízeného systému (procesor s minimálním počtem 6 jader, maximální pracovní frekvencí alespoň 4 GHz a L3 cash pamětí alespoň 8 MB, minimální velikost operační paměti 32 GB DDR, SSD harddisk s minimální velikostí úložného prostoru pro ukládání a analýzu naměřených dat 1 TB a grafická karta s alespoň 4GB RAM). PC musí být připojitelné do lokální sítě za účelem přenosu dat.
* Součást dodávky bude kompletní instalace systému a zaškolení minimálně 5 pracovníků.

*Součástí dodávky je řídicí a ovládací PC s operačním systémem Windows 10 (64-bit), procesor s 6 jádry, maximální pracovní frekvencí alespoň 4,7 GHz a L3 cash pamětí 12 MB, s operační paměti 32 GB DDR, SSD harddisk s úložného prostoru pro ukládání a analýzu naměřených dat 2 TB a grafická karta s 16 GB RAM). PC je připojitelné do lokální sítě za účelem přenosu dat (Dokument 15).*