

Příloha č. 1 - Technické podmínky
Měření korozních vrstev - Ramanova mikrospektroskopie

1. Kupující v zadávacím řízení poptal dodávku zařízení vyhovujícího následujícím technickým požadavkům:

Je požadována dodávka měřicího a vyhodnocovacího systému pro Ramanovu mikrospektroskopii. Systém musí obsahovat mikroskop pro zaměření bodů na vzorcích a měření tzv. Ramanových map. Systém musí být stolního typu. Součástí systému musí být software pro měření a vyhodnocování naměřených spekter a vytváření map. Měřené vzorky budou většinou pevného charakteru o velikosti 0,5x0,5cm až 5x5cm, půjde především o analýzu pevných vzorků, které budou pocházet z korozních experimentů ocelí (Fe) a mineralogické látky.

Číslo	Technické a funkční vlastnosti	Požadovaná hodnota
► Základní popis		
1	Ucelený měřicí a vyhodnocovací systém pro Ramanovu mikroskopii	ANO
► Požadavky Ramanova mikrospektroskopu		
2	Disperzní Ramanův konfokální mikrospektrometr s jedním laserovým zdrojem o vlnové délce v oblasti od 500nm do 650nm	ANO
3	Výkon laseru větší nebo roven 30 mW	ANO
4	Rayleighův filtr, difrakční mřížky, ND filtry a laser lze automaticky nastavovat z ovládacího SW bez manuálního zásahu uživatele	ANO
5	Pro excitační laser je požadován Rayleigh filtr typu edge s hranou menší nebo rovnou 100 cm^{-1} od excitační linie	ANO
6	Spektrální rozlišení (FWHM) lepší nebo rovno $1,2 \text{ cm}^{-1}$ při použití dané excitační vlnové délky	ANO
7	Možnost měření spekter v širším spektrálním rozsahu od hrany edge filtru (menší nebo rovnou 100 cm^{-1}) až do nejméně 5000 cm^{-1}	ANO
8	Sestava počítačové řízených šedých filtrů umožňující nastavit intenzitu excitačního laserového svazku na vzorku v rozmezí minimálně 0,1 - 100 % jeho jmenovité intenzity, přičemž musí být možno nastavit nejméně hodnoty v těchto rozmezech: (100 %); (50±10 %); (20±10 %); (10±5 %); (1±0,5 %); (0,1±0,05 %)	ANO
9	Spektrometr je propojen s optickým mikroskopem s reflexním osvětlením vzorku a s min dvěma objektivy s tím že mikroskop musí obsahovat jeden objektiv se zvětšením 5 - 10x, jeden objektiv se zvětšením 20x - 50x	ANO
10	Vizualizace vzorku na PC je zajištěna pomocí vestavěné videokamery	ANO
11	Citlivost Ramanova spektrometru musí umožňovat detekci 3. a 4. řádu křemku a pásů O2 a N2	ANO
12	Pro vytváření Ramanových map požadujeme k mikroskopu motorizovaný stolek XYZ s krokem 100 nm či menším v XY a 100nm či menším v Z s rozsahem pohybu nejméně 100 x 70mm v XY. Ovládání stolku lze realizovat ručně nebo ze softwaru	ANO
13	Konfokalita přístroje umožňující měření z oblasti o velikosti $\leq 1 \mu\text{m} \times 2 \mu\text{m}$ (XY x Z)	ANO
14	Automatického zaostřování spolu s motorizovaným ovládáním ostření osy Z tak, aby systém automaticky upravil zaostření na vzorek pro optimální analýzu Ramanova spektra	ANO
15	Propojení laseru se spektrometrem musí být realizováno jako pevné pomocí zrcadlové optiky, bez použití vláknové optiky z důvodu možných optických ztrát.	ANO
16	Termoelektricky chlazený CCD detektor na minimálně minus 60°C s čipem o rozlišení nejméně 1024 x 256 pixelů a citlivostí v rozsahu nejméně od 400nm do 1050nm.	ANO
17	Možnost budoucího upgrade na další excitační lasery - minimálně 2 další excitační linie	ANO
18	Příslušenství pro 180° osvit vzorků	ANO
19	Počítač CPU MARK větší nebo rovno 3000, datové uložení - kapacita min. 0,5 TB, rychlost 7200 ot.; DVDR-RW; 2x USB 3.0; 1x GBe port; + monitor min. 22", rozlišení full-HD, klávesnice a myš + operační systém Windows 7 Professional) s předinstalovaným řídicím software	ANO
20	Operační systém PC - Windows 7 a vyšší	ANO
22	Software pro automatizované ovládání přístroje, vyhodnocování a prezentaci naměřených dat	ANO
23	Sada standardních vzorků pro ověření správné funkčnosti zařízení, min. 3 různé standardy.	ANO
24	Knihovna Ramanových spekter pro mineralogické a anorganické látky, nejméně 1000 spekter.	ANO
26	Návod k obsluze spektrometru v anglickém jazyce.	ANO
27	Návod k obsluze spektrometru v českém jazyce.	ANO

Uchazeč podáním nabídky garantuje Zadavateli splnění požadavků a parametrů předmětu plnění veřejné zakázky, které jsou podrobně specifikovány v této příloze.

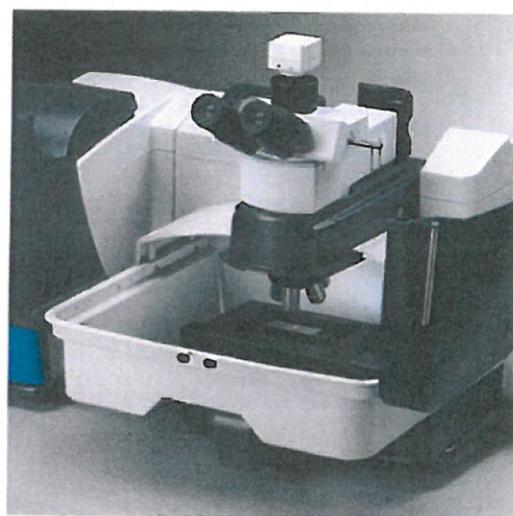
Nicolet CZ s.r.o.
 Klipáčkova 2242/9. CZ - 149 00 Praha 4
 DIČ: CZ26422182
 www.nicoletcz.cz



Nicolet CZ s.r.o., Klapávkova 2242/9, 149 00 Praha 4
Společnost zapsána v OR v Praze, Oddíl C, vložka 80993
IČ: 26422182, DIČ: CZ26422182
e-mail: nicoletcz@nicoletcz.cz www.nicoletcz.cz
Tel./Fax: 272 760 432, 272 768 569, 272 773 356-7

NABÍDKA DISPERZNÍHO RAMANOVA KONFOKÁLNÍHO MIKROSKOPU NICOLET DXR2 RAMAN MICROSCOPE S PŘÍSLUŠENSTVÍM

PRO CENTRUM VÝZKUMU ŘEŽ S.R.O.



**VEŘEJNÁ ZAKÁZKA: „SUSEN – MĚŘENÍ KOROZNÍCH VRSTEV –
RAMANOVA MIKROSPEKTROSKOPIE“**



EVROPSKÁ UNIE
Evropské strukturální a investiční fondy
Operační program Výzkum, vývoj a vzdělávání



Nabídka č. N299/16

8.7.2016



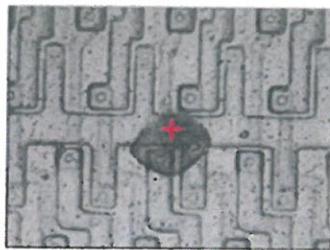
Společnost Nicolet CZ s.r.o. je certifikována
dle normy ČSN EN ISO 9001:2001

Nabídka disperzního Ramanova mikroskopu Nicolet DXR2 s příslušenstvím pro CENTRUM VÝZKUMU ŘEŽ S.R.O.

Už nemusíte být Ramanovým specialistou, abyste využili sílu Ramanovy mikroskopie resp. spektroskopie!

Disperzní Ramanův mikroskop Nicolet DXR2 je přístroj určený pro aplikace vyžadující vysoké prostorové rozlišení, jednoduchost přípravy vzorků a využití silných stránek Ramanovy mikroskopie. Byl vyvinut speciálně pro analytiku, techniky a vědce, kteří přesně vědí, jakou informaci chtějí, ale nemají čas ani touhu se stát specialistou na Ramanovu spektroskopii, a taky pro experty hledající lepší odpovědi rychlejším způsobem. Hlavními výhodami tohoto unikátního přístroje jsou:

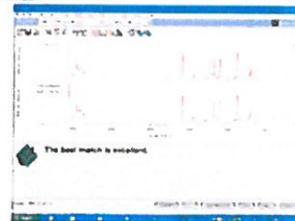
- **Autoexpozice a autofokus – jako u digitálních fotoaparátů. Již žádné hledání optimálních parametrů měření metodou pokus – omyl!**



Point



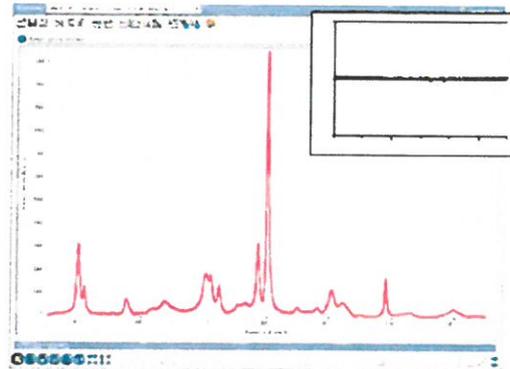
Shoot



Answer

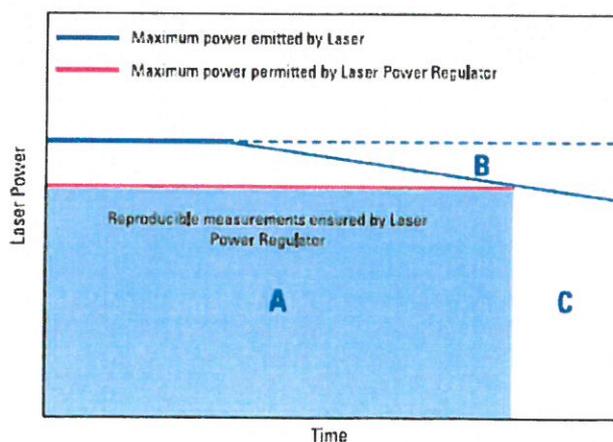
- Prostorové rozlišení 1 μm v osách X a Y, hloubkové rozlišení 2 μm (osa Z).
- Až čtyři různé excitační lasery pro optimální spektra obtížných vzorků.
- Regulátor výkonu laseru pro stálý dodávaný výkon laseru na vzorku.
- Konfokální design, vynikající vizuální kvalita.
- Patentovaný systém automatické justáže pro maximální výkon.
- Rychlá, automatická mnohobodová kalibrace pro jistotu v identifikaci vzorků.
- Kompatibilita s mnoha kvalitními mikroskopickými díly značky Olympus.
- Volitelná laserová bezpečnost třídy 1 – nejsou potřeba žádné úpravy pracoviště.

Ramanův mikroskop Nicolet DXR2 má unikátní design spektrografu, který na rozdíl od běžných Ramanových spektrometrů nevyžaduje dodatečnou justáž přístroje při změně excitačního laseru. Všechny volitelné součásti přístroje – lasery, mřížky a filtry – využívají technologie SmartLock pro naprosto reprodukovatelné umístění a automatické rozpoznávání zapojené součástky. Vpravo vidíte 150 spekter téhož vzorku. Před každým měřením byla vyjmuta a znovu zasazena mřížka. Přístroj je proto možné kdykoli dodatečně upgradovat na vyšší rozlišení, jinou vlnovou délku excitačního laseru, vláknovou optiku, to vše bez nutnosti dodatečného seřizování servisním technikem. Jen se dokoupí potřebný díl.



Mikroskopová část přístroje používá na nekonečno korigovanou konfokální optiku. Objektivy a jiné optické díly vyrábí společnost **Olympus**. Mikroskop je vybaven trinokulárem pro vizuální náhled a zároveň videoobraz. Hlava může nést až 5 objektivů - 4x, 10x, 20x, 50x, 100x, olejově-imerzní, s dlouhou pracovní vzdáleností... Osvětlení může být standardní nebo brightfield/darkfield. Obraz může být dále upraven analyzátorem polarizace, jako fluorescenční nebo systémem DIC. Mikroskopický stůl může být manuální nebo motorizovaný, s dvěma různými stupni preciznosti posunu. Pojme i rozměrné vzorky, vyhřívané, chlazené a jiné speciální nástavce, well-plates...

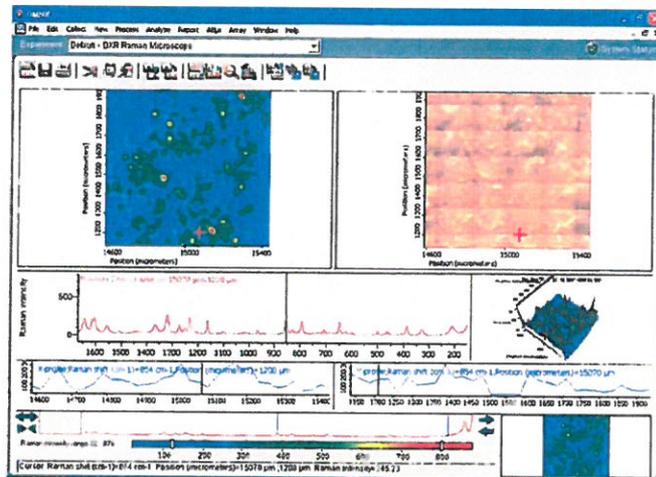
Systém měření spekter zahrnuje jako klíčové prvky **autofokus** pro získání maximální intenzity Ramanova signálu a **autoexpoziční** pro výpočet optimální doby expozice a počtu expozičních. Spektra fluoreskujících vzorků mohou být automaticky korigována. Přístroj si automaticky měří pozadí v době prostojů, takže je pak vždy připraven k měření spekter vzorků (systém **Smart Background**). Intenzita výsledného Ramanova spektra je automaticky korigována na vlnočtovou závislost detektoru. Regulátor výkonu laseru dodává na vzorek vždy stejný zářivý výkon bez ohledu na postupné stárnutí laseru během jeho stárnutí. Garantuje se tak stálá Ramanova odezva ve spektrech, což je obzvláště důležité pro kvantitativní analýzu. Software taky automaticky detekuje a odstraňuje artefakty spekter způsobené částicemi kosmického záření.



Aby bylo dosaženo maximální kvality, reprodukovatelnosti a vlnočtové správnosti měřených Ramanových spekter, je **Ramanův mikroskop Nicolet DXR2** vybaven patentovaným nástrojem pro automatickou justáž optiky, kterou se dosáhne přesná souosost laserového paprsku, Ramanovy emise, viditelného obrazu a vlasového kříže mikroskopu. Zároveň nástroj slouží ke kalibraci vlnových délek na emisní čáry neonové lampy, ke kalibraci laserové frekvence na pásy polystyrenového standardu a ke kalibraci intenzity spektra na standardizovaný zdroj bílého světla.

Přístroj je řízen uživatelsky velice vřidným a léty prověřeným programem **Omnic**. Identifikaci neznámých vzorků usnadňuje nejrozsáhlejší dodávaná elektronická knihovna Ramanových spekter. Omnic poskytuje taky možnost simultánního porovnání infračerveného spektra vzorku s databází IČ spekter a Ramanova spektra vzorku s databází Ramanových spekter (*Linked Search*).

Další, s Omnicem dokonale integrované programy, umožňují automatizované měření a analýzu naměřených spekter z plošných měřicích nástavců (well plates apod. – **Omnic Array Automation**), mapování vzorků a analýzu obrazu (**Omnic Atlas**), měření a vyhodnocování časově proměnných vzorků (chemické kinetiky, polymerace, vytvrzování apod. – **Omnic Series**), automatizaci rutinních měření (**Omnic Macros Basic/Pro** a **Visual Basic**), a také kvantitativní a kvalitativní analýzu vzorků (**TQ Analyst**).



Pro legislativně vysoce regulovaná prostředí, jako je farmaceutický průmysl, je k dispozici program **ValPro**, sloužící k designové, instalační a operační kvalifikaci **Ramanova mikroskopu Nicolet DXR2** dle normy ASTM E1840. Program může taky provádět kontroly přístroje nastavené na vlastní standardy uživatele – performance qualification. Historie všech validací a kvalifikací je sledována a digitálně archivována.

Ramanův spektrometr Nicolet DXR2 SmartRaman má stejně jako **Ramanův mikroskop Nicolet DXR2** unikátní design spektrografu, který na rozdíl od běžných Ramanových spektrometrů nevyžaduje dodatečnou justáž přístroje při změně excitačního laseru. Všechny volitelné součásti přístroje – lasery, mřížky a filtry – využívají technologie SmartLock pro naprosto reprodukovatelné umístění a automatické rozpoznávání zapojené součástky.

Aby bylo dosaženo maximální kvality, reprodukovatelnosti a vlnočtové správnosti měřených Ramanových spekter, je **Ramanův spektrometr Nicolet DXR2 SmartRaman** vybaven patentovaným nástrojem pro automatickou justáž optiky jako již výše popisovaný **Ramanův mikroskop Nicolet DXR2**. Nástroj zároveň slouží ke kalibraci vlnových délek na emisní čáry neonové lampy, ke kalibraci laserové frekvence na pásy polystyrenového standardu a ke kalibraci intenzity spektra na standardizovaný zdroj bílého světla.

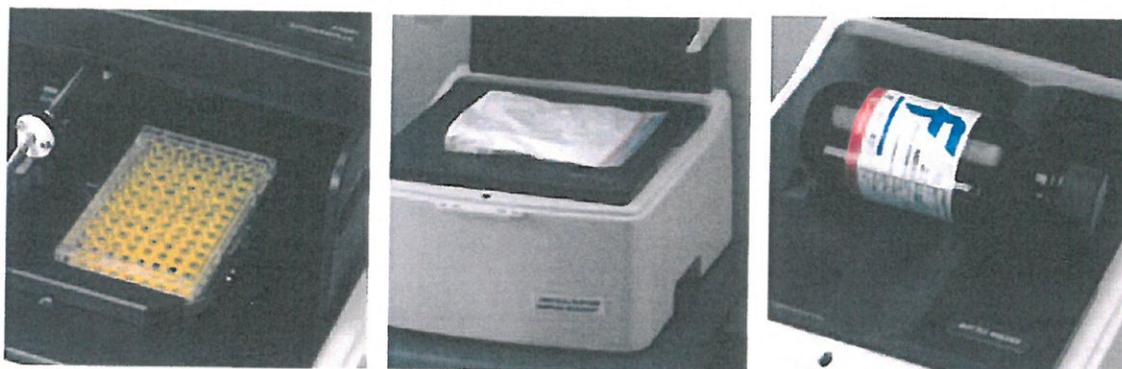
Jak je již uvedeno v předcházejícím textu jsou oba přístroje řízeny identickým uživatelsky velice vřídlným a léty prověřeným programem **Omnic**. Revoluční program pro identifikaci čistých látek a směsí je **Omnic Specta**. Zároveň je to také správce všech spektrálních databází a jednotlivých infračervených a Ramanových spekter uložených kdekoli ve vašem počítači. Obsahuje databáze více jak 14.000 Ramanových spekter organických a anorganických látek.

Příslušenství pro Ramanův spektrometr **Nicolet DXR2 SmartRaman** je velice různorodé, protože vzorky přicházejí do laboratoře v různých skupenstvích, tvarech a baleních. Je proto důležité mít k dispozici různé typy nástavců pro minimalizaci přípravy vzorku před měřením jejich Ramanových spekter. V případě kontroly vstupních surovin, popř. QC analýzy umožňují tyto nástavce vynechat odběr vzorku (měření v sudech, pytlích, lahvích atd.).

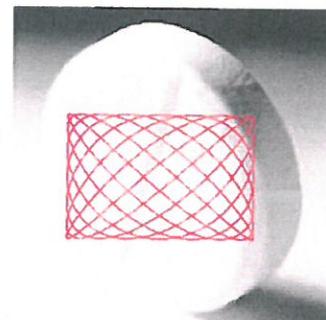


Spektrometr **Nicolet DXR2 SmartRaman** obsahuje nejen možnost tří různých excitačních laserů, ale právě i několik různých vzorkovacích nástavců. Příprava vzorku uživatelem je tak naprosto minimální a úspora času obrovská. Jednotlivá příslušenství lze mezi sebou jednoduše a rychle vyměňovat, spektrometr si dané příslušenství sám identifikuje a nastaví parametry měření. Do vzorkového prostoru tohoto spektrometru lze jednoduše aplikovat až 4 typy tzv. „univerzálních měřicích nástavců“ (fixované umístění pinned-in-place). Každý tento měřicí nástavec lze pak jednoduše použít v závislosti na daném typu vzorku:

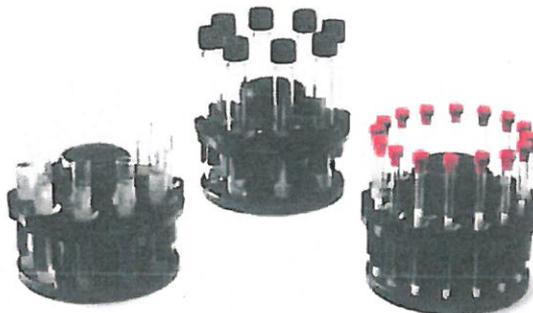
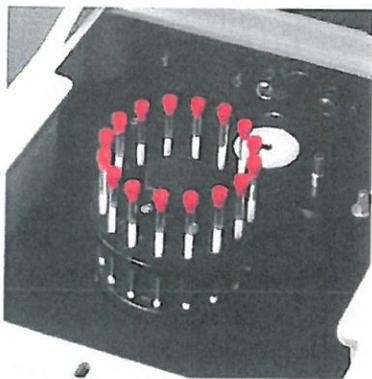
- Držák lahví (Bottle Holder): měření Ramanových spekter obsahu standardních skleněných či plastových lahví
- Držák tablet (Tablet Holder): měření Ramanových spekter tablet různých velikostí
- Universální držák (Universal Plate): měření obsahu plastových sáčků, vialek atd.
- Array autosampler: automatizace měření tzv. multi-well vzorků



Velmi užitečnou součástí **Nicolet DXR2 SmartRaman spektrometru** je možnost u heterogenních vzorků (např. tablet) využít měření Ramanových spekter pomocí technologie „Variable Dynamic Point Sampling“ (VDPS). Při jejím použití dochází k uživatelsky nastavitelnému zprůměrnování Ramanových spekter z různých částí heterogenního vzorku, výsledkem je pak dokonale reprezentativní Ramanovo spektrum.



Další možností automatizovaného sběru Ramanových spekter jsou karuselové autosamplery práškových, či kapalných vzorků. Uživatelsky vyměnitelné karusely existují ve dvou velikostech, a to pro 5-ti a 13-ti mm zkumavky. Při měření spektra pak dochází ještě k rotaci vzorku samotného. Opět je tak pro každý vzorek získáno reprezentativní spektrum, a to i pro vzorky heterogenní.

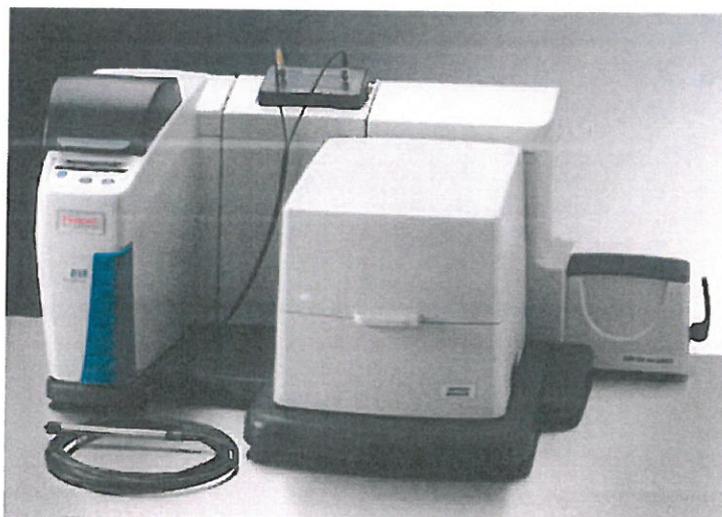


Základní měřicí technikou pro laboratoře s větším množstvím vzorků v různých velikostech, tvarech a



skupenstvích je 180° uspořádání (back scattering). Součástí příslušenství je několik různých typů držáků, takže lze měřit Ramanova spektra obsahu vialek, zkumavek, obsahu sáčků, fólii, tablet atd. Toto příslušenství umožňuje i jednoduché zapojení různých specializovaných typů měřících cel (kryogenní, vysokoteplotní, elektrochemické, cely s kontrolou vlhkosti atd.).

Ramanovy spektrometry **Nicolet DXR2 SmartRaman** a mikroskop **Nicolet DXR2** umožňují pomocí jednoduchého nástavce připojení vláknové optiky různé délky, a to pro všechny typy laserů. Lze tak rychle měřit vzorky i mimo Ramanův spektrometr (v lahvích, sáčcích, pytlích atd.).



1. TECHNICKÁ DATA DISPERZNÍCH RAMANOVÝCH SPEKTROMETRŮ NICOLET DXR2 A JEJICH SOUČÁSTÍ

1.1 Disperzní Ramanův mikroskop NICOLET DXR2

Kompletní technickou specifikaci naleznete v produktové specifikaci „*Thermo Scientific DXR2 Raman Family*“. Zde jsou zmíněny jen ty nejpodstatnější údaje.

Vlastnost	Specifikace
Obecné vlastnosti	Systém s jedním laserovým paprskem. Podporuje 4 vlnové délky excitačních laserů. Vyměnitelné součásti jsou přesně uchycované (SmartLock) a softwarově sledované (Smart components). Přístroj komunikuje s PC přes USB 2.0 nebo 3.0 porty.
Spektrograf	Typ TRIPLET, bez pohyblivých dílů. Absolutní spektrální rozsah 400 – 1050 nm. Spektrální rozklad průměrně 2 cm ⁻¹ na CCD pixel při mřížce pro maximální rozsah, průměrně 1 cm ⁻¹ na CCD pixel při mřížce pro maximální rozlišení.
Rayleighovy filtry	pro Stokesovy linie
Vláknová optika	Volitelná, uživatelsky instalovatelná
Spektrální rozlišení	Standardně 5.0 cm ⁻¹ FWHM
Standární spektrální rozsah	3250 – 50 cm ⁻¹ (při excitačním laseru 785 nm), 3500 – 50 cm ⁻¹ (při excitačním laseru 532 nebo 633 nm), 3500 - 85 cm ⁻¹ (při excitačním laseru 455 nm)
Vysoké spektrální rozlišení	1.2 cm ⁻¹ FWHM
Spektrální rozsah při vysokém rozlišení	1800 – 50 cm ⁻¹ (při excitačním laseru 785 nm, 532 nm nebo 633 nm)
Prostorové rozlišení (x, y)	Standardně ≤ 3 μm, s vysoce přesným motorizovaným stolem 1 μm (omezeno difrakcí)
Citlivost (signal-to-noise, 15 s měření)	laser 532 nm 3000:1, laser 633 nm 900:1, vysokojasový laser 785 nm 750:1
Vlnočtová správnost	2 cm ⁻¹ RMS
Vlnočtová přesnost	0.25 cm ⁻¹ RMS
Mikroskop	Na nekonečno korigovaná optika
Stolek	Standardní motorizovaný stolek (krok 1 μm). Rozsah pohybů (X a Y) 125 mm x 75 mm. Vysoce přesný motorizovaný stolek (krok 0.1 μm), rozsah pohybů (X a Y) 100 mm x 75 mm. Softwarové řízení zaostření.
Objektivy se standardní pracovní vzdáleností	dle výběru: 4x, 10x, 20x, 50x, 100x
Objektivy s dlouhou pracovní vzdáleností	dle výběru: 10x, 20x, 50x, 100x
Imerzní objektivy	dle výběru: 50x, 100x
Další možnosti mikroskopu	Adaptér pro velké vzorky, Brighfield/Darkfield, analyzátor polarizace, DIC
Validace	Volitelný program ValPro pro validaci všech měřicích módů systému podle normy ASTM E1840. IQ, OQ, NIST certifikované standardy.
Požadavky na napájení	100 - 240V, AC 48 – 63 Hz, 3.2 A max.
Rozměry, hmotnost	Š x H x V = 97 x 69 x 61 cm, 56.7 kg

2. 1. ŘÍDÍCÍ A VYHODNOCOVACÍ PROGRAM OMNIC® 9



Software pro molekulovou (FTIR a Raman) spektroskopii pracující pod operačním systémem Microsoft Windows (např. Win 7 Prof.). Umožňuje současné měření a zpracovávání spekter (multitasking), jejich editování, modifikaci zobrazení, analyzování, vytváření protokolů včetně textových komentářů, výpočet statistických spekter, matematické operace se spektry a vytváření panelů nástrojů pro zjednodušení ovládání.

Zde jsou uvedeny pouze některé rysy.

a) Měření, zobrazení a ukládání spekter

- System Performance Verification - diagnostický program pro kontrolu přístroje, pro PQ, nastavení termínů preventivní údržby atd.
- zobrazování měřených spekter v reálném čase, jednoscanový náhled na spektrum (preview)
- volba všech parametrů měření v menu Setup s možností jejich ukládání do souborů
- automatická expozice
- autofokus
- Smart Background - měření pozadí v době prostojů
- automatická korekce intenzity – konzistentní odezva přístroje pro všechny excitační lasery
- automatická korekce fluorescence
- hlášení velikosti stopy excitačního laseru na vzorku
- plný multitasking, provádění jiných operací v průběhu měření, X-View box, Roll a Zoom
- zobrazení více spekter v jednom okně - nad sebou nebo přes sebe, interaktivní změna rozsahu zobrazení, popis pásů horizontálně i vertikálně s možností editace písma
- Undo funkce
- výstup na tiskárnu, ukládání na média samostatně nebo ve skupinách
- transformace dat z formátů Nicolet 205, DX a SX a do formátů JCAMP DX, ASCII, CSV, Windows Meta File, Galactic, Mattson, PerkinElmer aj.
- možnost výběru příkazů pomocí panelu nástrojů

b) Zpracování spekter

- **Jednoduchý výběr parametrů** pomocí grafických symbolů, menu anebo pomocí obvyklých Windows krátkých klíčů (CTRL + C atd.)
- **Spektrální subtrakce**, automatická nebo interaktivní korekce základní linie, vyhlazování spekter, fourierovská self-dekonvoluce FSD s volitelnými parametry.
- **Korekce a konverze dat** – ATR korekce včetně pokročilé, Kubelka - Munk, inovovaná Kramer's - Kronigova funkce, fotoakustická korekce, korekce vody a oxidu uhličitého
- **Korekce fluorescence**
- **Spektrální matematika** – uživatelsky tvořitelné matematické funkce
- **Statistické spektrum** - výpočet generující z označené skupiny spekter průměrné spektrum (AVERAGE), zobrazení směrodatných odchylek (VARIANCE) a rozpětí (RANGE) hodnot Y pro každý bod zvolených spekter, volba mezi přímým spektrem a jeho 1. nebo 2. derivací.
- **Search** – kompletní práce s knihovnami spekter, výběr ukázkových cca 1400 HR spekter z velkých databází, tvorba uživatelských knihoven, textové vyhledávání, podmíněné vyhledávání, 5 srovnávacích algoritmů, neomezená volba prohledávaných spektrálních regionů (jeden nebo více)
- **QCheck** - verifikace naměřeného spektra vůči jednomu či více spektrům standardů pro potřeby QA/QC. Možnost zvýšení citlivosti pro vysoce podobná spektra.
- **Report** – menu příkazů pro tvorbu, zakládání a prohledávání protokolů.
- **Nástroje pro interpretaci spekter (InterpretIR+)** a on-line průvodce - interaktivní interpretační program – nabízí nejpravděpodobnější funkční skupiny přítomné ve vzorku.

2.2 Volitelné doplňkové programy

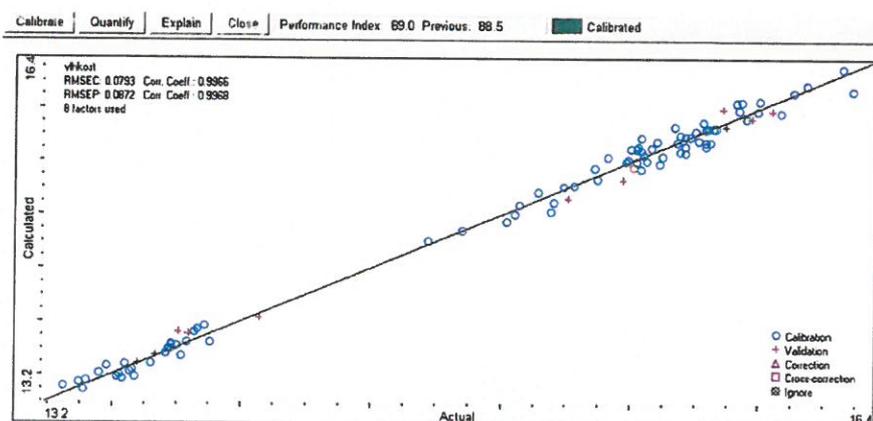
- **OMNIC Spectra Material Characterization - Analytical Raman** - program pro identifikaci čistých látek a směsí, zároveň správce všech spektrálních databází a spekter uložených kdekoli ve vašem počítači. Obsahuje databázi více než 14.000 Ramanových spekter.
- **OMNIC Linked Search** software – kombinované vyhledávání IČ a Ramanova spektra v knihovnách.
- **Peak Resolve** pro separaci překrývajících se pásů
- **TQ Analyst EZ Edition** - software pro kvantitativní analýzu (Lambert-Beer a CLS), klasifikaci (Similarity Match, Search Standards) a vyhodnocování spekter (výšky, plochy, poměry pásu...)
- **SpectraCorr 2D** pro 2D IR spektroskopii
- **OMNIC Series** pro měření sérií spekter (chemická kinetika apod.)

2. 3. SPEKTRÁLNÍ ANALYTICKÝ SOFTWARE OMNIC® TQ ANALYST™ Professional Edition



Volitelný program TQ Analyst™ Professional Edition je obsáhlá softwarová platforma pro vývoj robustních kvantitativních a kvalitativních analytických metod, přístupná uživatelům všech úrovní zkušenosti. Je mocným nástrojem pro extrakci informací z Vámi naměřených Mid-IR, Near-IR nebo Ramanových spekter. Zahrnuje procesy od ohodnocení spekter standardů, zohlednění optické dráhy záření ve vzorku, korekcí a matematických úprav spekter, výběr regionů pro získání žádaných informací až po diagnostické nástroje pro zhodnocení kvality vyvinuté analytické metody. Zde jsou uvedeny některé jeho rysy.

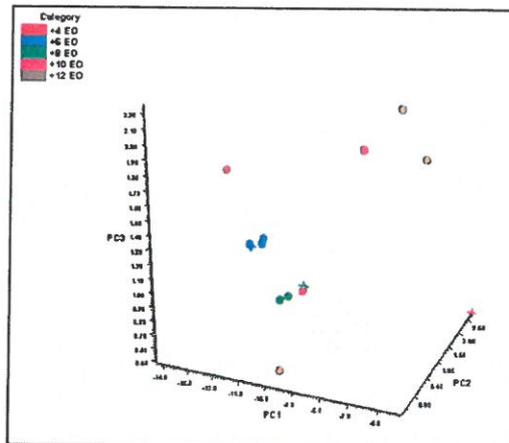
- Výběr algoritmů pro kvantitativní analýzu: Lambert-Beer, Classical Least Squares, Stepwise Multiple Linear Regression, Partial Least Squares, Principal Component Regression. S výběrem algoritmu pomáhá Suggest Analysis Type Wizard.
- Výběr algoritmů pro kvalitativní analýzu: Similarity Match, Distance Match, Discriminant Analysis, Search Standards, QC Compare Search. S výběrem metody pomáhá Suggest Analysis Type Wizard.
- Nástroj pro „měření“ spekter – pozice, výšky, plochy, pološířky pásů, šum, průměrné výšky pásů, Center Of Gravity aj.
- Kalibrace s konstantní, známou, vypočítávanou nebo ze spekter predikovanou optickou dráhou.
- Kalibrační okno přehledně ukazuje, jak dobře kalibrační křivka odpovídá realitě včetně vyčíslení hodnotících parametrů jako je korelační koeficient, RMSEC, RMSEP, Performance Index apod.



- Vývoj metod usnadňují softwaroví průvodci pro ohodnocení uskutečnitelnosti metody (Assess Feasibility Wizard), pro ohodnocení standardů a návržení jejich doplnění (Evaluate Standards and

Suggest Standard Wizards) a pro výběr spektrálního regionu s nejvyšší informační hodnotou (Suggest Regions Wizard).

- Diagnostické nástroje, které prozkoumávají vytvořenou metodu a ukazují, jak ji vylepšit: Detekce odlehklých spekter standardů, Leverage, PRESS, Pure Components Spectra, Principal Components Scores v 2D a 3D zobrazení, hodnocení metody křížovou validací a externí validací.
- Příklady pro vyhodnocení jednoho či více spekter, generování protokolů pro jeden vzorek či souhrnného protokolu pro více vzorků, varování či zamítnutí vytvoření protokolu při nesplnění zadaných podmínek (dostatečná shoda vyhodnocovaného spektra se standardy v metodě, příliš velká vzdálenost od těžiště klastrů, vybočení z mezí kalibrace apod.)
- Široká spolupráce s jinými programy: V programu Omnic lze používat zkalibrovanou metodu k vyhodnocování spekter, aniž by byl TQ Analyst v počítači nainstalován. Programy Macros Basic, Macros/Pro, Result a Microsoft Visual Basic jsou schopny zkalibrované metody TQ Analyst implementovat pomocí DDE příkazů do běhu různých automatizovaných postupů a specializovaných softwarových aplikací.



2. 4. MACROS/BASIC A MACROS/PRO

Umožňují tvorbu a využití uživatelských automatizovaných postupů.

K dispozici jsou další speciální počítačové programy nebo lze zhotovit program na zakázku podle přání zákazníka.

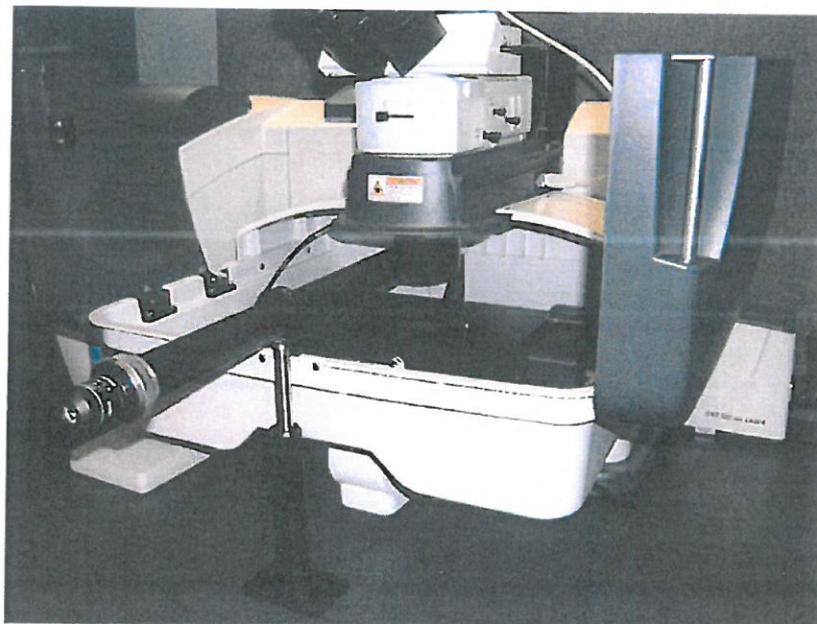
3. Příslušenství pro kalibraci přístroje

- **Kalibrace přístroje** při instalaci včetně protokolu dle ASTM E1840 - služba **Spektrotest Plus Standard** 2x ročně včetně podrobného protokolu (po dobu 1 roku v ceně přístroje).
- Souprava kalibračních standardů dle National Institute of Standards (USA).
- Na vyžádání provedeme zdarma instalační a operační kvalifikaci Ramanova mikroskopu.

4. Extended Reach Macro Sample Adaptor:

Adaptér pro měření Ramanských spekter vzorků mimo vzorkový prostor Ramanského mikroskopu DXR2. K mikroskopu se připojuje místo standardní otočné hlavy (nosepiece) s objektivy. Při aplikaci tohoto adaptéru na Ramanský spektrometr se v případě jeho užívání mění třída bezpečnosti z Class I na Class IIIb.

- Délka adaptéru 48 cm
- Objektiv se zvětšením 20x na konci adaptoru, možnost jednoduché instalace jakéhokoliv BF objektivu
- Fokusační kroužek na konci adaptéru pro přesné zaostření na povrch vzorku
- Žádná ztráta Ramanova signálu
- Sada: Class IIIb laser operations kit
- Ochranné brýle jsou součástí sady



5. Specializovaný mikroskopický stolek LINKAM LTS420:

Mikroskopický stolek pro měření vzorků za nízkých a vysokých teplot. Rozsah teplot -196°C až 420°C . Stolek umožňuje automatický posun ve směru osy Z (konfokální Ramanské měření hloubkových profilů). Pohyb stolku v osách X a Y je standardně manuální $15 \times 15 \text{ mm}$, součástí dodávky je interface pro umístění na motorizovaném mikroskopickém stolku spektrometru. Otvor pro umístění vzorku je 2.5 mm .

Sestava obsahuje stolek Linkam LTS420, cirkulační čerpadlo Eheim pro chlazení těla stolku při měření při teplotách nad 300°C , řídicí jednotku teploty, řídicí software teploty Linsys32, spolupracující se spektroskopickým programem Omnic, jednotku pro chlazení vzorku kapalným dusíkem, náhradní vyhřívací element.



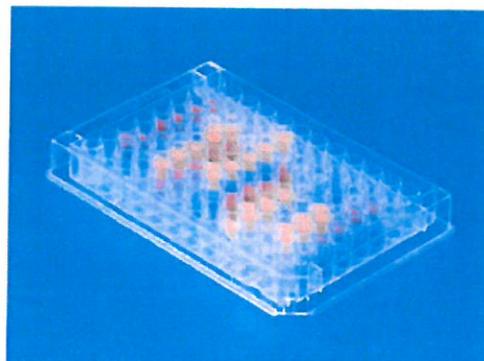
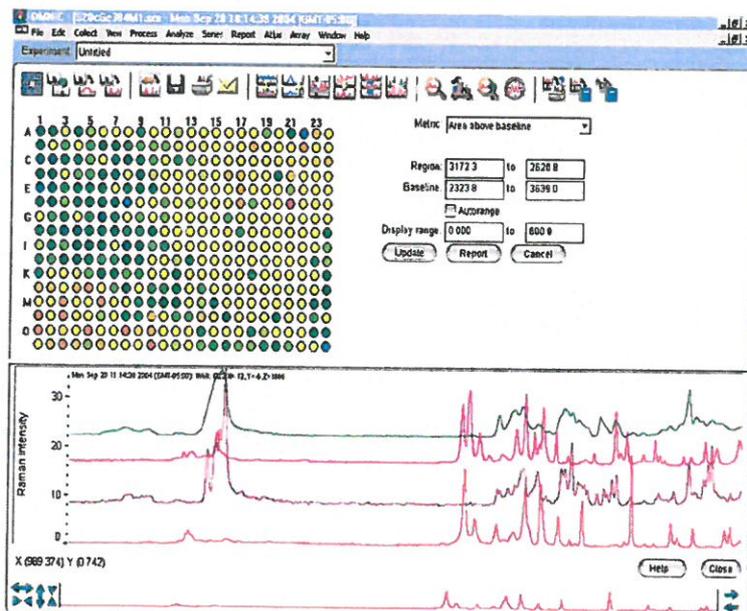
6. Speciální objektiv OLYMPUS:

Při měření pomocí specializovaného stolku LINKAM HP420 (zvláště při vysokých teplotách) je vhodné nepoužívat standardní objektivy. Součástí nabídky je proto specializovaný objektiv Planfluorit 50x (LMPLFLN 50x) s dlouhou pracovní vzdáleností 10,6mm, zvětšení 50x (běžně se tento objektiv používá pro pozorování předmětů v teplotních komorách až do 600°C). Při měření pomocí speciálního stolku LINKAM, lze s výhodou tento objektiv použít i pro měření hloubkových profilů (konfokální Ramanská analýza).



7. Příslušenství Well Plate

Kombinace tohoto příslušenství a softwaru Omnic Array Automation umožňuje standardizované automatické měření vzorků v nástavcích typu well plate s 96ti pozicemi pro Vaše vzorky. Software Omnic Array Automation pak následně umožňuje rychlé a přehledné vyhodnocování dat, včetně grafické, chemometrické (zejména shlukové analýzy). Možností je i kompatibilita s LIMS.



Součástí software Omnic je v tomto případě tzv. array automatizace, kde lze nastavit počet i polohu pozic v daném well plate držáku. Pak jsou automaticky proměřena Ramanova spektra v daných pozicích. Tyto spektra lze pak pomocí softwaru analyzovat např. clusterovou analýzou.

8. Řídící počítač

- procesor Intel i5, CPU MARK větší nebo rovno 3000
- 4 GB RAM
- 1 TB pevný disk, rychlost 7200 ot
- grafická karta min. 256 MB
- klávesnice, optická myš, kabely
- LCD monitor 24 palců, rozlišení full-HD
- DVDR-RW drive
- 2x USB 3.0; 1x GBe port;
- zvuková karta, reproduktory, klávesnice a myš
- MS Windows 7 Professional, CZ
- předinstalovaný řídící software

Konfiguraci počítače lze upravit podle přání kupujícího. Dodavatel si vyhrazuje možnost úpravy konfigurace k lepšímu. Odběratel může použít vlastní počítač srovnatelných parametrů.

9. Sestava určená pro Vaše pracoviště (nabídka N299/16)

Sestava umožňuje měření a vyhodnocování Ramanových spekter makroskopických a mikroskopických vzorků pomocí disperzního Ramanova mikroskopu *Nicolet DXR2 Raman Microscope* pro strukturní analýzu včetně mapování povrchu vzorku. V případě zájmu o rozšíření doporučené sestavy o další komponenty anebo metody nás laskavě kontaktujte.

1.	<p>Ramanský mikroskop Nicolet DXR2 Raman Microscope – propojení mikroskopu je konstrukčně řešeno jako pevné pomocí zrcadlové optiky, bez použití vláknové optiky.</p> <p>Obsahuje:</p> <ul style="list-style-type: none">- patentovaný spektrograf Triplet- termoelektricky chlazený CCD detektor na bázi Peltierova efektu – 2048x256 pixelů; pracovní teplota -60°C, citlivost ve spektrálním rozsahu 400-1050 nm- citlivost Ramanova spektrometru umožňuje detekci 3. a 4. řádu křemíku a pásů O2 a N2- Smart komponenty (laser, mřížka, filtr, vláknová optika) pro jednoduchou a reprodukovatelnou výměnu a komunikaci se softwarem Omnic- Laser Power Control System – kontinuálně laděná regulace výkonu laseru po 0.1 mW (Výkon je regulovatelný v absolutní škále, tedy ve fyzikálních jednotkách a při daném nastavení je spolehlivě znám) – reprodukovatelnost výkonu laseru na vzorku nezávislá na stáří a aktuálním výkonu laseru. Záznam provozní doby laserů – sledování předpokládané doby životnosti laserů- automatickou kalibraci spektrometru (kalibrace vlnových délek a intenzit pásů)- mikroskop vědecké třídy s možností volby brightfield nebo brightfield/darkfield reflexní iluminace (zvolena brightfield iluminace), 180° osvit vzorků- možnost transmisní iluminace- trinokulární hlavu s vestavěnou videokamerou a 10x okuláry- 10x a 50x objektiv- pětipolohový nosič objektivů- vysoce přesný motorizovaný, počítačem řízený mikroskopický stolek s dráhou pohybu 100 x 70 mm, rozlišením (pohybem) XYZ 100 nm a autofokusem pro automatickou úpravu zaostření na vzorek pro optimální analýzu Ramanova spektra- hardwarový a softwarový joystick na ovládání pohybu stolku se vzorkem- počítačem řízené nastavování velikosti a tvaru apertury- patentované automatické seřizování viditelného světla, primární laserové dráhy a dráhy rozptýleného záření na detektor – precizní zamíření na stejnou stopu při výměně excitačního laseru – automatická justace vizuálního modu, laserového a Ramanova záření- integrované kalibrační zdroje, softwarově řízená kalibrace<ul style="list-style-type: none">o automatická kalibrace vlnových déleko automatická kalibrace frekvence excitačních laserůo automatická kalibrace intenzit pásů- motorizované nastavování velikosti a tvaru apertury- sadu standardních vzorků pro ověření správné funkčnosti zařízení, 3 různé standardy.- pravou konfokální optiku- konfokální hloubkové profilování s krokem do 2 mikrometrů
----	---

	<ul style="list-style-type: none"> - standardní spektrální rozsah 3500 – 50 cm⁻¹ (při excitačním laseru 532 nm) - výběrový spektrální rozsah 6000 – 50 cm⁻¹ (při excitačním laseru 532 nm) - standardně spektrální rozlišení 5 cm⁻¹ - výběrové spektrální rozlišení 1,2 cm⁻¹ - možnost volby mezi budícími lasery 455, 532, 633 a 785 nm - běžná výměna všech dodaných laserů, difrakčních mřížek i filtrů Rayleighova rozptylu je proveditelná uživatelsky (tj. bez nutnosti servisního zásahu) - možnost budoucí polarizace dodaných laserů - možnost připojení vláknové optiky pro nabízený excitační laser - možnost budoucího připojení DSC - možnost rozšíření systému o adaptér pro přímé měření spekter kapalných a pevných vzorků mimo mikroskopický stolek, uvedený nástavec může sloužit k měření objemných vzorků, které není možné vložit do samotného mikroskopu (bez použití vláknové optiky) - možnost rozšíření spektrometru např. o kryogenní a vyhřívanou celu, elektrochemické příslušenství, vícepolohové zařízení pro měření pevných a kapalných vzorků (mikro plate nebo well plate) apod. - sada integrovaných ovládacích tlačítek na krytu mikroskopu, umožňujících např. zahájení měření a start vícekrokových operací (jako např. měření, zpracování a vyhodnocování spekter) bez návratu k počítači - automatizované měření temného pole CCD detektoru (spektrometr má ve své paměti uloženy všechny typy pozadí se všemi různými parametry např. různé doby expozice, teplota CCD kamery,...) - Knihovna Ramanových spekter anorganických látek a minerálů – obsahuje 1.527 Ramanových spekter - manuály a technická dokumentace v českém a anglickém jazyce <p>Ovládací, vyhodnocovací a diagnostický software Omnic® for Dispersive Raman pro Ramanovy spektrometry umožňující mj. spektrální matematiku a práci s knihovnamí spekter (včetně možnosti automatického odstraňování fluorescence a kosmického záření). Dále program Omnic umožňuje náhled na spektrum v reálném čase (preview), automatické nastavení podmínek měření vzorků v závislosti na uživatelem požadované hodnotě odstavu signálu od šumu (autoexpozice), funkci photobleaching a přepínání mezi pozorováním vzorku mikroskopem a měřením Ramanových spekter.</p> <p>Software Omnic Atlas na automatické mapování (2D a 3D zobrazení) jednotlivých bodů, po přímce, na ploše (osa x, y) nebo hloubkové profilování (osa z) a vyhodnocování včetně zjištění čistých složek z mapy – MCR zpracování.</p>
2.	<p>Sada Smart 532 nm green Excitation Laser Set</p> <ul style="list-style-type: none"> - Smart depolarizovaný vysokojasový budící laser, Solid State, Diode Pumped - výkon 18 mW, maximální tok energie na jednotku plochy vzorku - zahrnuje laser, napájecí zdroj a Smart vstupní optiku - Smart filtr Rayleighova rozptylu (typu Edge), hrana 50 cm⁻¹ Stokes - Smart mřížky pro plný rozsah 50-6000 cm⁻¹, spektrální rozlišení 10 cm⁻¹, 5 cm⁻¹, resp. 1,2 cm⁻¹ - běžná uživatelsky proveditelná výměna všech dodaných laserů, difrakčních mřížek i filtrů Rayleighova rozptylu

3.	Datastanice Intel i5 s příslušenstvím dle popisu
----	---

Nabídková cena doporučené sestavy (body 1 až 3), bez DPH 21%	2.192.600,- Kč
DPH 21% (ze základu 2.192.600,- Kč)	460.446,- Kč
Nabídková cena doporučené sestavy (body 1 až 3), včetně 21% DPH	2.653.046,- Kč

10. Všeobecné dodací podmínky

Originální technická specifikace výrobce, dokládající splnění technických podmínek, je k dispozici na požádání v anglickém jazyce.

Cena: se rozumí včetně instalace, uvedení zařízení do provozu, českých manuálů, zaškolení (podrobněji viz níže), cla a dopravy (Madison USA – Řež).

Zaškolení: (provádí dodavatel u konečného odběratele). V ceně každého přístroje je základní třídenní zaškolení obsluhujícího personálu přímo ve vaší laboratoři v českém jazyce, dále individuální týdenní metodické školení zaměřené na praktické využití FTIR spektrometrie, přípravu vzorků, použití programu TQ Analyst, kalibraci apod. Účast na kurzech měření spekter, interpretace apod., celkem **4 ks kursového** dle výběru. V dalších letech vždy **1 ks kursového**. Trvalá podpora v uplatnění spektrálních metod ve vašich specifických podmínkách a trvalé informování o novinkách v FT-IR, FT-NIR a Ramanovy spektroskopie.

Záruka: 24 měsíců na práci a díly s výjimkou spotřebního materiálu a excitačních laserů Ramanových spektrometrů (12 měsíců). Záruka začíná instalací, nejpozději 1 týden po dodání. Záruka neplatí v případě poškození vnějšími vlivy nebo poškození hardware nebo software následkem nesprávného zacházení.

Záruka na jakost: ISO 9001:2009, plná validace systému při instalaci včetně protokolu, bezplatná validace systému - „Spektrotest Plus“ 2x ročně fyzická kontrola (po dobu 1 roku).

Dodací lhůta: viz. návrh kupní smlouvy

Servis: Nicolet CZ, Praha, **stálá bezplatná telefonická a e-mailová servisní a aplikační služba** (Po - Pá 8 - 17), **sklad náhradních dílů**.

Platební podmínky: viz. návrh kupní smlouvy

Platnost této nabídky: dle požadavků zadavací dokumentace.

Instalační podmínky: Suchá místnost bez organických a anorganických par, 230V/50Hz, stabilizováno.

Se srdečným pozdravem,

Za Nicolet CZ s.r.o.

Dr. Ján Pásztor

Jednatel

602 325 829



Nicolet CZ s.r.o.
Klapálkova 2242/9. CZ - 149 00 Praha 4
DIČ: CZ26422182
www.nicoletcz.cz