

NABÍDKA IS50 FT-RAMAN MODULU K FT-IR SPEKTROMETRU NICOLET IS50 PRO ČVUT V PRAZE, FJFI

NABÍDKA Č. N076/24



únor 2024

Nabídka FT-Raman modulu k FTIR spektrometru Nicolet iS50

Jedinečný nástroj pro další zlepšení charakterizace materiálů

Ramanova spektroskopie je mocným nástrojem pro zkoumání složení a struktury polymerů, aktivních farmaceutických substancí, anorganických látek a řady dalších materiálů. Velmi vhodně doplňuje informace získané infračervenou spektroskopií. Zatímco ta je citlivá především na funkční skupiny a vysoce polární vazby, Ramanova spektra ze svého principu podávají informaci o struktuře základního řetězce molekuly a o málo polárních a nepolárních funkčních skupinách. Zásadní je taky standardní schopnost Ramanových spektrometrů poskytovat spektrální informace i ze vzdálené infračervené oblasti spektra – to u FT-IR spektrometrů vyžaduje podstatné změny v optice přístroje a často také profukování dusíkem či kvalitně sušeným vzduchem. Tato schopnost je přínosná zvláště pro anorganické materiály, např. plniva. Díky minimální potřebě úprav vzorků před měřeními je Ramanova spektroskopie vhodná pro studium krystalinity, polymorfismu, fázových přechodů apod.

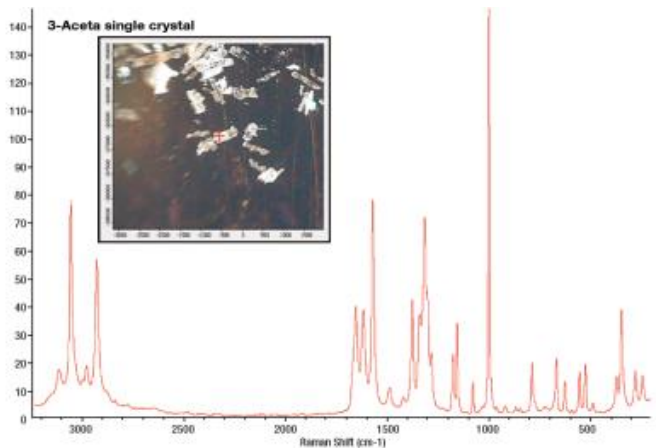
iS50 FT-Raman modul tak přidává nové dimenze analýzy materiálů ve farmaceutických, forenzních, makromolekulárních a jiných analytických laboratořích. Ke špičkovým měřicím schopnostem FT-IR spektrometru **Nicolet iS50** přidává schopnost měřit kvalitní Ramanova spektra různorodých vzorků, včetně velmi malých, a to bez dodatečných nároků na prostor v laboratoři. Jeho vlastnosti:

- **Při hmotnosti pouhých 8 kg** je jeho instalace a práce s ním velmi jednoduchá. Nízkou hmotností a kompaktností umožnilo také to, že InGaAs detektor Ramanova záření je umístěn přímo v FT-IR spektrometru Nicolet iS50.
- **Diodový laser o vlnové délce 1064 nm** je kompaktní, provozně spolehlivý a má dlouhou životnost.

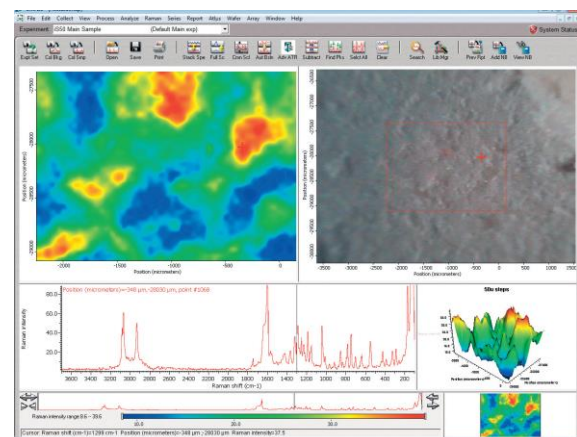
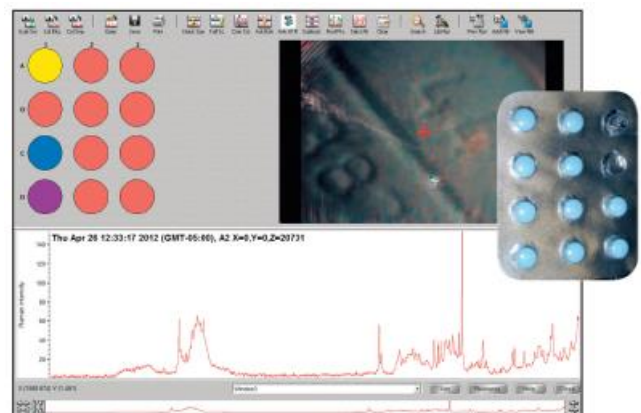


Poskytuje zářivý výkon na vzorku až 500 mW. Konkrétní velikost výkonu na vzorku je softwarově nastavitelná, minimum je 50 mW. Pro velmi citlivé vzorky lze paprsek příkazem ze software rozostří z běžné velikosti stopy 60 μm na přibližně 1 mm. Díky uzavřenosti optiky a zdvojeným bezpečnostním spínačům je iS50 FT-Raman modul z hlediska bezpečnosti práce laserovým produktem té nejbezpečnější úrovně – třídy 1.

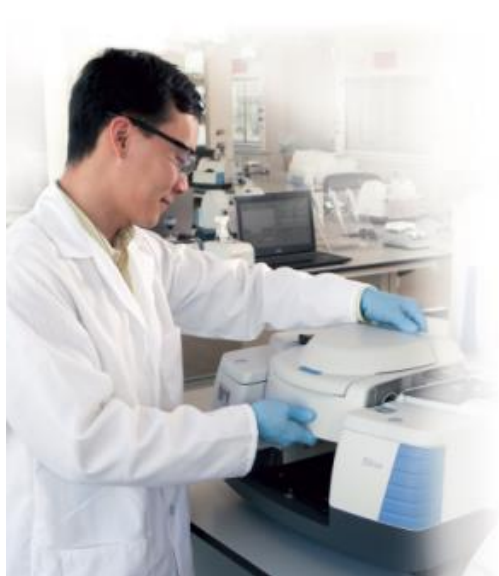
- **Motorizovaný mikroskopický stolek** s krokem 5 μm a rozsahem pohybů 100 x 62,5 x 21,5 mm umožňuje měření vzorků umístěných na různých podkladech, např. na mikroskopických podložních sklíčkách, v držácích vialek o třech nebo čtyřech pozicích nebo v kovových well-plates o devíti či čtyřiceti osmi pozicích. Příkaz **Autofokus** rychle nastaví vhodnou pozici vzorku v zetové ose pro dosažení maximálního Ramanova signálu. **Vestavěná kamera** s USB propojením s počítačem snímá obraz vzorku trvale – díky neinterferujícímu LED osvitu i během měření vzorku!



- **Programy integrované do hlavního řídicího programu Omnic** umožňují automatizované měření Ramanových spekter vzorků umístěných v přednastavených pozicích (**Omnic Array Automation**) a auto-matizované mapování vzorků a analýzu obrazu (**Omnic Atlas**). Tento program také zjednodušuje výběr přesného místa měření Ramanova spektra vzorku na pouhé kliknutí myši (point and shoot). Celkový obraz vzorku může být nasnímán jako mozaika. Následně mohou být vytyčeny a měřeny mapy, a to jako bodové (kliknutím myši vybraná místa vzorku), liniové (řez) nebo jako komplexí plošné mapy.



- **System jednoduchového ovládání** FT-IR spektrometru Nicolet iS50 je aplikován rovněž na iS50 FT-Raman modul. Při jeho vložení do hlavního vzorkového prostoru FT-IR spektrometru se příslušné modré tlačítko stává jeho ovládacím tlačítkem.
- **Podpora Nicolet CZ:** Poskytujeme **zdarma** rozsáhlé zaškolení, trvalou bezplatnou aplikační podporu v uplatnění spektrálních metod ve vašich specifických podmínkách a trvalé informování o novinkách v FTIR a Ramanově spektrometrii. Součástí aplikační podpory je možnost zprostředkovaného přístupu do velkých spektrálních databází (při zaslání Vašich spekter v digitální podobě). Dle zadání uživatelů vyvíjíme analytické metody, tvoříme nové knihovny spekter a jiný speciální software. Organizujeme také



setkání uživatelů FTIR a Ramanových spektrometrů dodávaných naší společností, pořádáme řadu vlastních specializovaných kurzů a podílíme se na obecných kurzech infračervené spektroskopie ve spolupráci s českou Spektroskopickou společností Jana Marka Marci. Pozáruční servis v České republice je s výjimkou případných použitých náhradních dílů **bezplatný** (neúčtují se odpracované hodiny ani cestovní výlohy).

2. Ovládací program - Omnic[®] 9



Uživatelsky vřidný FTIR software pracující pod operačním systémem Microsoft Windows. 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. Zároveň diagnostikuje aktuální stav spektrometru a umožňuje provádět jeho validace a kvalifikace. Zde jsou uvedeny pouze některé rysy.

a) Měření, zobrazení a ukládání spekter

- implementovaný systém jednotekového ovládání
- System Performance Verification - diagnostický program pro kontrolu zdroje IČ záření, laseru, napájení, detektoru a elektroniky, dále pro PQ, nastavení termínů preventivní údržby atd.
- panel nástrojů s ikonami nejpoužívanějších příkazů, snadno editovatelný
- zobrazování měřených spekter v reálném čase, jednoscanový náhled na spektrum (preview)
- volba všech parametrů měření v menu Experiment Setup s možností jejich ukládání do souborů a snadným vyvoláním z výklopného seznamu Experiment
- možnost automatické atmosférické korekce, ATR korekce a jiných korekcí při nebo po měření
- plný multitasking, tj. provádění jiných operací v průběhu měření
- spektrální hledáček pro intuitivní práci s výřezy spekter, Roll and Zoom Window pro pokročilou práci se zobrazením spekter
- zobrazení více spekter v jednom okně - nad sebou, přes sebe nebo rozestoupeně, popis pásů horizontálně i vertikálně s možností editace písma
- Undo funkce
- výstup na standardní nebo virtuální PDF tiskárnu, ukládání spekter 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.

b) Zpracování spekter

- **Jednoduchý výběr parametrů** pomocí ikon, menu, pravé klávesy myši anebo pomocí obvyklých klávesových zkratk Windows (CTRL+C, CTRL+V apod.)
- **Spektrální odečet**, 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, interaktivní Kramer's - Kronigova funkce, fotoakustická korekce, korekce vzdušné vlhkosti a oxidu uhličitého
- **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
- **Library Manager** – správce spektrálních knihoven, jejich vytváření, editace, spojování, hledání podle klíčového slova...
- **Search** – kompletní práce s knihovnamí spekter, výběr cca 1400 ukázkových spekter z velkých databází, tvorba uživatelských knihoven, textové vyhledávání, podmíněné vyhledávání, pět srovnávacích algoritmů, neomezená volba počtu prohledávaných spektrálních regionů
- **QCheck** – matematické porovnání naměřeného spektra s jedním zobrazeným či s více uloženými spektry. Možnost zvýšení citlivosti pro vysoce podobná spektra.
- **Report** – menu příkazů pro tvorbu, zakládání a prohledávání protokolů.
- Nástroje pro interpretaci spekter a on-line průvodci

c) Doplnkové programy

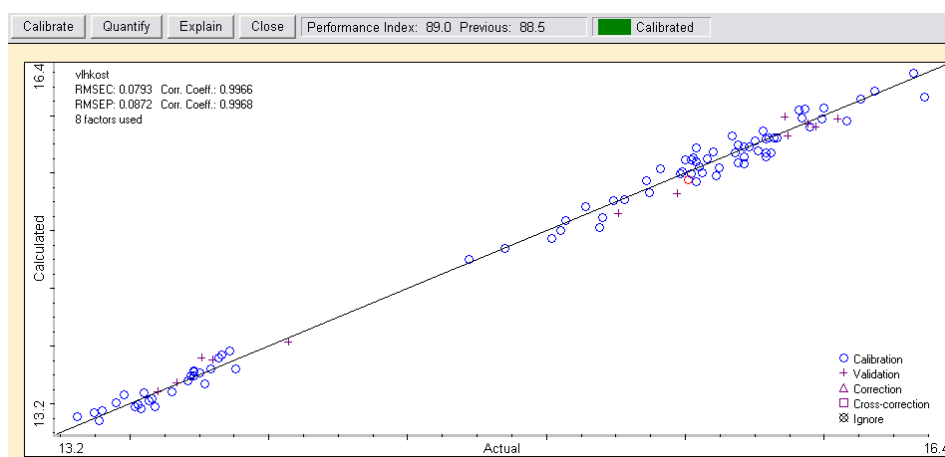
- **Peak Resolve** pro separaci překrývajících se pásů
- **OMNIC Macros Basic** pro tvorbu automatizovaných postupů – maker
- **TQ Analyst EZ Edition** - software pro kvantitativní analýzu (Lambert-Beer a CLS), klasifikaci (Similarity Match, Search Standards) a vyhodnocování spekter (výšky, plochy, poměry pásu...)
- **Omnis Spectra** – volitelný software. Revoluční program pro identifikaci čistých látek a směsí a zároveň správce všech spektrálních databází a jednotlivých infračervených spekter uložených kdekoliv ve vašem počítači. Obsahuje ve standardní verzi databázi minimálně 9000 vysokorozlišených (HR) infračervených spekter. K dispozici jsou také verze s databázemi rozšířenými speciálně pro analýzy plastů, plynů, forenzní analýzy aj.
- **SpectraCorr 2D** – volitelný software pro 2D IR spektroskopii
- **OMNIC Series** – volitelný software pro měření sérií spekter (chemická kinetika apod.)

d) Spektrální analytický software TQ Analyst™ Professional Edition



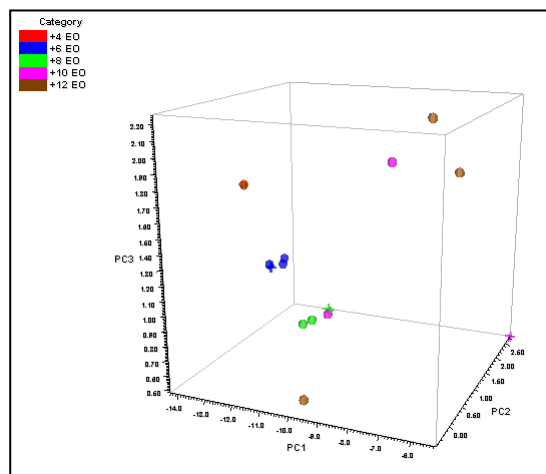
Volitelný program TQ Analyst™ Professional Edition je obsáhlá softwarová platforma pro vývoj robustních kvantitativních a kvalitativních analytických metod, přístupná uživatelům všech úrovní zkušenosti. Je mocným nástrojem pro extrakci informací z Vámi naměřených Mid-IR, Near-IR nebo Ramanových spekter. 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 navržení 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 odlehlých 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.

3. Příslušenství pro kalibraci přístroje

- kontrola, seřízení a kalibrace přístroje při instalaci včetně protokolu dle ASTM E1421-99
- služba **Spektrotest Plus EZ** po dobu 1 roku v ceně přístroje, software, flash disk a sada standardů pro korespondenční kontrolu a kalibraci FTIR spektrometru

4. Sestava doporučená pro Vaše pracoviště (N076/24)

Doporučená sestava umožňuje měření a vyhodnocování Ramanových spekter pevných, práškových, pastovitých a kapalných vzorků, vývoj kvalitativních analytických modelů. V případě zájmu o rozšíření doporučené sestavy o další komponenty anebo metody nás laskavě kontaktujte.

1.	FT- Ramanův modul integrovaný do vzorkového prostoru. Obsahuje: <ul style="list-style-type: none">- CaF₂ dělič paprsků- mikroskopický X-Y-Z stolek s krokem 5 μm včetně držáků vzorků- InGaAs detektor Ramanova záření- excitační laser 1064 nm, výkon 50 – 500 mW- USB kameru- spektroskopický program Omnic pro FT-Ramanův modul- program na automatizaci měření a vyhodnocování Array Omnic 9 Automation- program pro automatizované mapování vzorků a analýzu obrazu Omnic Atlas- manuál v českém a anglickém jazyce- řídicí počítač
-----------	--

Nabídková cena sestavy pro ČVUT v Praze, FJFI bez 21% DPH	1.749.000,- Kč
DPH 21% (ze základu 1.749.000,- Kč)	367.290,- Kč
Nabídková cena sestavy pro Institut pro ČVUT v Praze, FJFI včetně 21% DPH	2.116.290,- Kč

5. Dodací podmínky

Cena zahrnuje veškeré poplatky spojené s dovozem zboží, cla, daně, dovozní a vývozní přírážky, licenční poplatky spojené s dodávkou zboží až do jejího funkčního předání v místě plnění (FJFI Břehová 7, Praha 1. Katedra jaderné chemie). Dále pak instalaci, uvedení do provozu a předvedení funkčnosti zboží, kvalifikaci spektrometru, české a anglické manuály, balné a dopravu.

Zaškolení: V ceně přístroje je základní třídenní zaškolení obsluhujícího personálu přímo ve vaší laboratoři (3 osoby), dále individuální týdenní metodické školení zaměřené na praktické využití FTIR resp. Ramanovy spektrometrie, přípravu vzorků, použití programu TQ Analyst, kalibrace, tvorbu automatizovaných postupů apod., rovněž v laboratoři uživatele. Účast na kurzech měření, interpretace spekter apod., celkem v prvním roce po instalaci přístroje **zdarma 4 ks kursového** dle výběru. V dalších letech vždy **1ks kursového zdarma**.

Trvalá podpora v uplatnění spektrálních metod ve vašich specifických podmínkách a trvalé informování o novinkách v FTIR a Ramanově spektroskopii. Součástí aplikační podpory je **možnost zprostředkovaného přístupu do velkých spektrálních databází** (nutné zaslání Vašich spekter v digitální podobě).

Záruka: 24 měsíců na práci (zahrnuje práci technika, cestovné a další možné náklady), **24 měsíců na díly** s výjimkou spotřebního materiálu (např. ATR krystaly, okénka, kyvety, NIR zdroje). Záruka začíná dnem následujícím po dni podepsání instalačního protokolu v místě plnění. Záruka neplatí v případě poškození vnějšími vlivy nebo poškození hardware nebo software následkem nesprávného zacházení.

Deklarovaná záruka na práci je 24 měsíců, nicméně pozáruční servis, poskytovaný společností Nicolet CZ s.r.o. už od jejího vzniku, je s výjimkou případných použitých náhradních dílů bezplatný (neúčtují se odpracované hodiny a cestovní výlohy) pro všechny systémy instalované v ČR. O zavedení plateb se v současnosti neuvažuje. Kompletní sklad náhradních dílů, z toho plyne možnost okamžitého servisního zásahu. Zabudovaný diagnostický software urychluje odhalení případné závady. Cena servisní hodiny: **zdarma**. Cena dopravy: **zdarma**.

Servis: Nicolet CZ, Praha, stálá telefonická servisní a aplikační služba v českém jazyce (Po - Pá 8 - 17), rozsáhlý **sklad náhradních dílů a příslušenství.**

Dodací lhůta: Dle podmínek Kupní smlouvy.

Platební podmínky: Dle podmínek Kupní smlouvy.

Platnost nabídky: Do **30. 6. 2024.** Po tomto datu si laskavě vyžádejte aktualizaci nabídky.

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

Thermo Scientific iS50 Raman Module

A unique tool to enhance your material characterization capabilities

The Thermo Scientific™ iS™50 Raman module adds new dimensions to material characterization in forensics, polymer, pharmaceutical and analytical laboratories. Mounted in the sample compartment, the iS50 Raman module adds analytical power to the Thermo Scientific™ Nicolet™ iS50 FT-IR spectrometer, without increasing its footprint, while delivering the performance of a dedicated module at a fraction of its price.



Raman spectroscopy is a powerful tool for investigating the composition and structure of polymers, APIs and many other materials. FT-Raman utilizes a long wavelength laser which greatly reduces fluorescence and produces clean spectra of many materials which are difficult to analyze by dispersive Raman. It also enables sampling through glass vials, polymer blister packs, evidence bags and similar packaging materials. The excellent co-adding properties of the FT system allow even weak signals to be acquired.

Typical Applications

- **Pharmaceuticals:** Polymorphism and other crystallinity studies
- **Polymers:** Crystallinity and inorganic fillers
- **Forensics:** 2 Class-A SWGDRUG techniques (FT-IR and Raman) in one system
- **Material Characterization:** Identity and morphology

Types of Samples

- Single crystals or fibers on microscopy slides
- Tablets and other solids for mapping or discrete measurements
- Liquids in vials
- Batch sampling, using 48-well plate array automation

The iS50 Raman Module Advantage

- Performance of standard, larger modules
- Ready to work with one-touch operation
- Motorized sampling stage and video capture standard
- Compact size (sample compartment), affordable price

Standard Software Tools

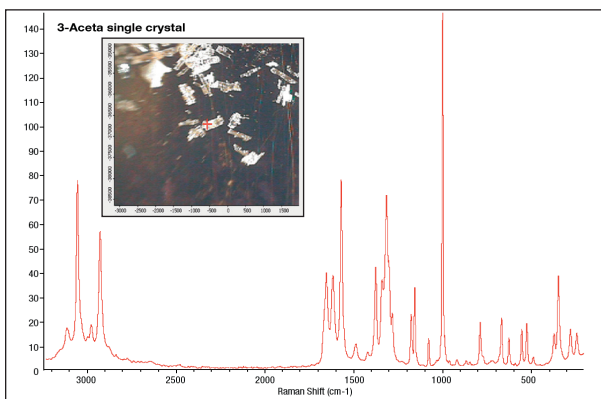
- Integration with Nicolet iS50 Touch Point operation
- User setup and control interface
- Thermo Scientific™ Microview™ and video for simple control
- Thermo Scientific™ OMNIC™ AtJus™ Mapping and Analysis software
- Thermo Scientific™ Array Automation™ data collect and analysis software for well plates
- Validation optional via Thermo Scientific™ ValPro™ validation software
- Direct links to Thermo Scientific™ OMNIC Spectra™ with multi-component search and Thermo Scientific™ TQ Analyst™ quantitative analysis package

Weighing only 8 kg, the iS50 Raman module is easy to install and simple to operate. The 1064 nm diode laser gives reliable operation and long lifetime, as well as 500 mW of laser power in a compact package. The InGaAs detector is mounted inside the Nicolet iS50 ensuring compactness of the system.

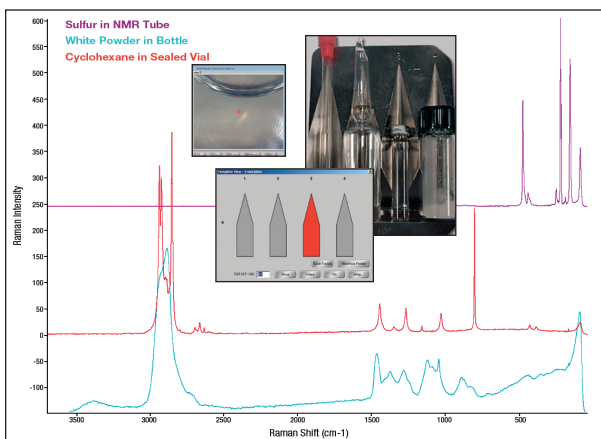


Thermo
SCIENTIFIC

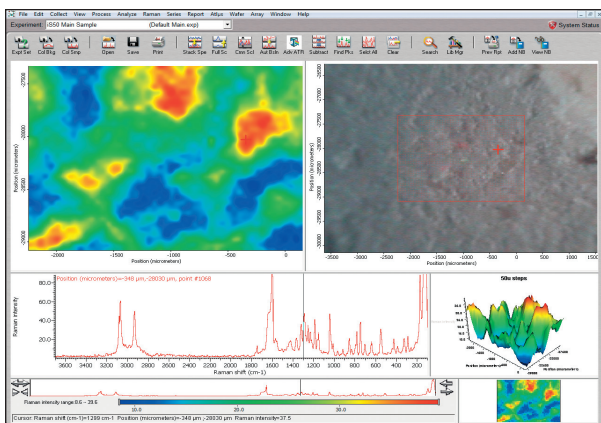
High-quality data can be obtained from the iS50 Raman module in seconds. Templates in the OMNIC software allow the user to drive quickly to a location near the sample, and then position the stage using simple X-Y-Z controls for a precise measurement. The Autofocus feature quickly adjusts the z-coordinate based on the Raman intensity, optimizing the signal for data collection.



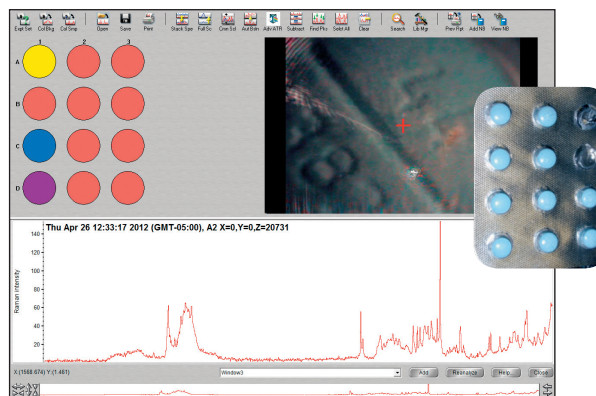
Single point collection in seconds with Autofocus to optimize intensity



Templates drive collection through single-click operations



Raman mapping driven by OMNIC Atlas Software: Collect and Analyze



Collect and analyze data in well plates or any regularly spaced array

iS50 Raman Module Specifications

Diode Laser	
Wavelength	1064 nm
Power	500–10 mW, Software settable
Spot Size	Less than 60 microns
Compliance	Class 1 Laser Product
Safety	Automatic Shutter Interlocks, Laser Filters
X-Y-Z Stage	
Range	100 mm front/back, 62.5 mm left right, 21.5 mm top/bottom
Step Resolution	5 micron steps
Sampling Plates	9-well, microscope slide, 3 and 4-vial, 48-well
Software	
Basic Operation	Standard OMNIC tools, laser power, white light controls
Point and Shoot	XY movement, autofocus
Regular Arrays	Array Automation Software Includes data collection and full analysis suite Video capture and storage during data collection Quantitative and Qualitative Analysis Cluster Analysis, Multiple Curve Regression
Mapping	Atlas Mapping Software Includes data collection and full analysis suite Video mosaic capture and storage during data collection Point, Line or Area Mapping
Camera	
	USB
Dimensions	
Weight	7.6 kilograms (16.8 lbs)

www.thermoscientific.com

©2013 Thermo Fisher Scientific Inc. All rights reserved. ISO is a trademark of the International Standards Organization. All other trademarks are the property of Thermo Fisher Scientific Inc. and its subsidiaries. This information is presented as an example of the capabilities of Thermo Fisher Scientific Inc. products. It is not intended to encourage use of these products in any manner that might infringe the intellectual property rights of others. Specifications, terms and pricing are subject to change. Not all products are available in all countries. Please consult your local sales representative for details.



Africa +27 11 822 4120	Denmark +45 70 23 62 60	India +91 22 6742 9434	New Zealand +64 9 980 6700
Australia +61 3 9757 4300	Europe-Other +43 1 333 50 34 0	Italy +39 02 950 591	Russia/CIS +43 1 333 50 34 0
Austria +43 1 333 50 34 0	Finland/Norway/Sweden +46 8 556 468 00	Japan +81 45 453 9100	Spain +34 914 845 965
Belgium +32 53 73 42 41	France +33 1 60 92 48 00	Latin America +1 561 688 8700	Switzerland +41 61 716 77 00
Canada +1 800 530 8447	Germany +49 6103 408 1014	Middle East +43 1 333 50 34 0	UK +44 1442 233555
China +86 10 8419 3588		Netherlands +31 76 579 55 55	USA +1 800 532 4752



Financováno
Evropskou unií
NextGenerationEU



Národní
plán
obnovy



Příloha č. 2 Kupní smlouvy

Seznam poddodavatelů / Čestné prohlášení

1. Název veřejné zakázky
<u>Ramanův spektrometr</u>

2. Účastník zadávacího řízení	
Obchodní firma:	Nicolet CZ s.r.o
Sídlo:	Klapálkova 2242/9, 149 00 Praha 4
IČO:	26422182
Právní forma:	Společnost s ručením omezeným

Účastník zadávacího řízení čestně prohlašuje, že nemá v úmyslu zadat určitou část výše uvedené veřejné zakázky jiné osobě, tj. poddodavateli.