

Parametry techniczne
Część 4: Analizator spektrofotometryczny FTIR**Analizator spektrofotometryczny FTIR:**

1. Analizator spektrofotometryczny musi zawierać wszystkie niezbędne połączenia i elementy gwarantujące jego pełną funkcjonalność;
2. Trwałe ceramiczne źródło promieniowania na zakres 9 600-400 cm^{-1} , niewymagające chłodzenia wodą. Monolityczna konstrukcja źródła ceramicznego powinna zapewniać brak migracji punktu aktywnego. Średni czas życia > 10 lat.
3. Dzielnik wiązki (beamsplitter): Ge/KBr na zakres spektralny nie mniejszy niż 7 800 - 350 cm^{-1} . Możliwość rozbudowy o dodatkowe beamsplitters gwarantujące pokrycie zakresu spektralnego co najmniej 27 000 - 20 cm^{-1} . Automatyczne rozpoznawanie rodzaju beamsplittera przez system.
4. Powinien zawierać wbudowany detektor DLaTGS z okienkiem KBr na zakres 12 000 - 350 cm^{-1} oraz wysokoczuły detektor MCT chłodzony ciekłym azotem z okienkiem CdTe na zakres co najmniej 11 700 - 600 cm^{-1}
5. Zdolność rozdzielcza lepsza niż 0.09 cm^{-1} (pomiar szerokości połówkowej pasma CO_2)
6. Powinien zawierać interferometr z dynamicznym justowaniem w czasie rzeczywistym zapewniający, że system w trakcie skanowania zawsze zachowuje optymalne ustawienie niezależnie od zmian temperatury, wibracji i innych zakłóceń. Interferometr Michelsona 90°, nie wymagający zasilania sprężonym powietrzem. Powinien być odporny na wibracje i wpływ zmian temperaturowych, justowany dynamicznie w trakcie skanowania z częstotliwością odpowiadającą częstotliwości przejść przez zero sygnału lasera nawet przy maksymalnej szybkości skanowania; mechanizm dynamicznego justowania wykorzystujący wiązkę lasera He-Ne, padającą na trójpozycyjny detektor laserowy, do monitorowania i utrzymywania idealnego względnego położenia kąowego zwierciadeł interferometru;
7. Posiadać system automatycznego rozpoznawania z poziomu oprogramowania akcesoriów i ustawiania parametrów w zależności od stosowanej przystawki i wymaganych parametrów.
8. Skanowanie liniowe z szybkością regulowaną w zakresie co najmniej 0.16 - 6.2 cm/s
9. Apertura regulująca moc wiązki, o powtarzalnej regulacji średnicy w zakresie 0-100% co 1%
10. Elementy układu optycznego montowane stabilnie na ławie optycznej za pomocą kołków pozycjonujących
11. Monolityczne zwierciadła w układzie optycznym pokrywane złotem
12. Możliwość rozbudowy o układ wejścia-wyjścia promieniowania obejmujący co najmniej: wyprowadzenie wiązki na zewnątrz w prawo, wyprowadzenie wiązki na zewnątrz w lewo, wprowadzenie wiązki skolimowanej, wprowadzanie wiązki zogniskowanej przez układ aperturowania wiązki
13. Poziom szumów (amplituda międzyszczytowa) nie przekraczający $7.9 \times 10^{-6} \text{Abs}$ (sygnał/szum $\geq 55\,000 : 1$) dla detektora DLaTGS, rozdzielczości 4 cm^{-1} przy pomiarze 1 min
14. Maksymalna szybkość zbierania danych nie gorsza niż 65 skanów/s dla rozdzielczości 16 cm^{-1} (odstęp danych 8 cm^{-1}) z opcją rozbudowy do co najmniej 90 skanów/s
15. Układ optyczny szczelny i osuszany z oddzielającymi przedział próbek okienkami KBr z powłoką niehigroskopijną. Możliwość rozbudowy o zastępujące okienka KBr automatycznie otwierane/zamykane przesłony między przedziałem próbek a wnętrzem spektrometru
16. Podłączenia do opcjonalnego przedmuchu spektrometru i przedziału próbek osuszonym gazem
17. Duża komora pomiarowa o wymiarach podstawy co najmniej 21 x 26 cm z wysokością wiązki 3.5" ponad podstawą; proste zdejmowanie pokrywy przedziału próbek bez używania narzędzi umożliwiające wygodną pracę w przypadku używania różnorodnych akcesoriów
18. Wbudowany moduł ATR wyposażony w kryształ diamentowy lity pozwalający na pomiar widm ATR w zakresie co najmniej 5000 – 100 cm^{-1} nie zajmujący przedziału pomiarowego z funkcją automatycznego przełączania wiązki między przedziałem próbek i przystawką, wyposażona w zintegrowany mechanizm dociskający
19. Przyciski do szybkiego uruchomienia pomiaru w poszczególnych modułach pomiarowych
20. Przystawka do pomiarów metodą cienkich warstw metodą "grazing angle": kąt padania 80°, zintegrowany polaryzator germanowy wbudowany w przystawkę, system przesuwu apertur zapewniający co najmniej 4 zmienne pola pomiarowe

od pełnego do 5mm, zestaw masek o wielkościach dobranych do apertur z podziałką umożliwiającą precyzyjne usytuowanie próbek, złote lustro referencyjne; przystawka automatycznie rozpoznawana przez spektrometr, powtarzalnie mocowana w przedziale pomiarowym i integrująca się z obudową spektrometru, po założeniu uszczelniająca drogę optyczną i jednocześnie włączona w system przedmuchu;

21. Przystawka ATR z możliwością grzania i naświetlania promieniowaniem UV analizowanej próbki:
 - mocowana stabilnie w aparacie bez konieczności justowania, wyposażona w podstawę z automatycznym rozpoznawaniem akcesoriów;
 - wyposażona w kryształ diamentowy lity na zakres co najmniej $4000 - 30 \text{ cm}^{-1}$ z możliwością grzania do co najmniej 210°C ;
 - kryształ - czysty diament, średnica co najmniej 3 mm, kąt padania – 45° ;
 - możliwość grzania do 210°C z dokładnością ustawienia temperatury $\pm 0,5^{\circ}$ do 100°C ;
 - wyposażona w klamrę dociskową o powtarzalnej sile docisku, zapewniająca pomiary ciał stałych, past i cieczy;
 - wyposażona w opcję iluminacji światłem UV -Vis spod kryształu ATR;
 - z kontrolerem wyposażonym w wyświetlacz z panelem dotykowym umożliwiający ustawienie temperatury;
 - oprogramowanie dedykowane do przystawki do sterowania temperaturą z komputera z możliwością ustawienia skoku temperaturowego i automatycznym gromadzeniem danych;
 - źródło promieniowania UV-Vis ze światłowodem i filtrem pasmowym 250-450nm;
22. Kuweta gazowa na długość drogi optycznej min. 10 m przeznaczona do badań gazów o stężeniach na poziomie ppb, ppm w tym zanieczyszczeń w paliwie wodorowym:
 - korpus z niklowanego aluminium;
 - wyposażona w płaszcz zapewniający kontrolę temperatury w zakresie od temp. pokojowej $+ 5^{\circ}\text{C}$ do 185°C ;
 - objętość kuwety nie większa niż 2 dm^3 ;
 - wyposażona w okienka ZnSe pokrywane warstwą antyrefleksyjną;
 - zestaw obejmujący kontroler temperatury wraz z manometrem;
 - odczyt wartości ciśnienia i temperatury w oprogramowaniu;
 - Metodyka ilościowa obejmująca oznaczenie śladowych zanieczyszczeń gazowych w paliwie wodorowym czystości Automotive, w tym: HCOOH , NH_3 , HCHO , H_2O , CO_2 , CO , CH_4 ;
 - Wbudowana na stałe w aparat automatyczna przystawka do testowania spektrometru z kołem z wzorcami, sterowana z poziomu oprogramowania, zawierająca co najmniej następujące wzorce:
 - folia polistyrenowa o grubości ok. $38 \mu\text{m}$ (1.5mil);
 - filtr szklany typu NG11;
23. Możliwość rozbudowy o polaryzator z automatyzacją regulacji kąta obrotu i wprowadzenia/usunięcia polaryzatora z wiązki;
24. Komunikacja aparatu z jednostką sterującą przez standardowy port USB 2.0/3.0
25. Zasilacz spektrometru umieszczony na zewnątrz aparatu eliminujący wprowadzanie wysokiego napięcia (prądu zmiennego 230V) do aparatu i zapewniający podwyższoną stabilność termiczną systemu
26. Sterowanie przez zewnętrzny komputer PC pracujący w systemie Windows. Program obsługi spektrometru co najmniej w języku polskim i angielskim kompatybilny z Windows 10/11 64-bit. Automatyczny wybór wersji językowej przy logowaniu do Windows i przez wybór opcji regionalnych w panelu sterowania Windows. Musi zapewniać:
 - logowanie użytkowników z hasłami i różnymi poziomami dostępu, funkcja automatycznego doboru wzmocnienia sygnału
 - funkcje wykonywania eksperymentów i analizy danych we wszystkich rodzajach eksperymentów
 - możliwość ustawiania zaawansowanych parametrów pomiarowych - funkcji apodyzacji (co najmniej Happ-Genzel, Beer-Norton, Blackman-Harris, Boxcar, Triangle, Cosine), korekcji fazy (Mertz, Power, deHaseth), wypełniania zerami (0, 1x, 2x), cyfrowych filtrów górnoprzepustowych i dolnoprzepustowych
 - podgląd widm zapisanych na dysku przed ich otwarciem (jak podgląd dokumentów w pakiecie Office)
 - dostęp do surowych danych łącznie z interferogramem;

- bezpośrednie otwieranie i zapisywanie danych spektralnych w najczęściej wykorzystywanych formatach widm IR, co najmniej: spc (m.in. GRAMS), spa (m.in. OMNIC), dx/jdx (JCAMP-DX), txt/csv (ASCII), gaml (GAML), abs/ras (WinFIRST);
 - funkcje przetwarzania widm: korekcja linii bazowej – automatyczna i manualna, dekonwolucja, odejmowanie spektralne, wyznaczanie pochodnych, znajdowanie maksimów, wygładzanie, transformacja Kramersa Kroniga, korekcja ATR, pomiar wysokości i położenia pasma, pomiar pola powierzchni pasm - bezwzględnej i względnej;
 - funkcja rozkładu pasm na składowe z algorytmem konwergencji typu Fletcher-Powell-McCormick, uwzględniająca co najmniej następujące typy pasm: Gaussian, Lorentzian, mieszany Gaussian/Lorentzian, Voigt;
 - przeszukiwanie bibliotek w celu identyfikacji widma nieznanego próbki oraz/lub porównania z widmem wzorca;
 - tworzenie własnych bibliotek użytkownika;
 - biblioteki widm obejmujące co najmniej 20 000 widm związków organicznych, węglowodorów, alkoholi, aldehydów, ketonów, estrów, związków fosforu, związków organometalicznych, barwników, polimerów syntetycznych, substancji nieorganicznych, w tym co najmniej:
 - 1700 widm polimerów i dodatków do polimerów;
 - 350 widm gum i dodatków do gum;
 - moduł oprogramowania do analiz chemometrycznych obejmujący algorytmy analizy ilościowej i klasyfikacyjnej – co najmniej następujące:
 - do analiz ilościowych:
 - * prawo Lamberta-Beera;
 - * klasyczna metoda najmniejszych kwadratów;
 - do analiz klasyfikacyjnych:
 - * przeszukiwanie biblioteki wzorców z analizą korelacji, także dla pochodnych widm;
 - * wektorowa analiza podobieństwa;
 - * analiza korelacyjna widm uśrednionych;
 - moduł do tworzenia i wykonywania makroinstrukcji,
 - moduł oprogramowania do pomiarów kinetycznych z wyświetlaniem rekonstrukcji Gram-Schmidta oraz śledzeniem co najmniej 5 profili w czasie;
 - moduł spektralnej interpretacji widm;
 - automatyczna korekcja zawartości CO₂ i pary wodnej przez oprogramowanie bez konieczności zbierania widm referencyjnych;
 - wyświetlanie widm w czasie rzeczywistym (w trakcie pomiaru);
 - automatyczne wykonywanie testów jakości widm z informowaniem użytkownika m.in. o niepożądanych pasmach spektralnych w widmie tła, nieprawidłowym kształcie pasm, obecności pasm całkowicie absorbujących, nachyleniu linii podstawowej, zbyt małej energii interferogramu;
 - aktywna diagnostyka w trakcie pomiaru z ciągłym monitorowaniem stanu elementów systemu i wizualnym wskaźnikiem poprawnej pracy aparatu;
 - wbudowany edytor do tworzenia raportów według własnych szablonów;
 - archiwizowanie gotowych raportów w nieedytowalnych skoroszytach elektronicznych z funkcją przeszukiwania skoroszytów umożliwiającą szybkie dotarcie do każdego raportu;
 - moduł rozszerzonej analizy widm obejmujący algorytm jednoczesnej wieloskładnikowej identyfikacji widm, pozwalający na identyfikację składników próbki w trakcie pojedynczego przeszukiwania biblioteki, bez konieczności stosowania odejmowania widm poszczególnych składników;
27. Zestaw komputerowy klasy PC parametrach minimalnych: procesor wielordzeniowy, 16 GB RAM, min. 512 GB SSD, karta sieciowa, klawiatura, mysz optyczna, monitor LCD co najmniej 23", kompatybilny z oprogramowaniem system operacyjny

Pozostałe wymagania analizatora spektrofotometrycznego:Rzeczpospolita
PolskaSfinansowane przez
Unię Europejską
NextGenerationEU

1. Instalacja, uruchomienie urządzenia wraz z przeszkoleniem użytkownika – co najmniej 1 dzień.

Do urządzenia należy dołączyć zestaw materiałów eksploatacyjnych w postaci krążki diamentowe, 50szt. płytki z ZnSe 5szt.



Rzeczpospolita
Polska

Sfinansowane przez
Unię Europejską
NextGenerationEU

