

Załącznik 1 – Opis przedmiotu zamówienia

Nabiurkowy spektrometr NMR z możliwością monitorowania reakcji chemicznych w czasie rzeczywistym

Przedmiotem zamówienia jest dostawa, instalacja oraz uruchomienie nabiurkowego spektrometru magnetycznego rezonansu jądrowego (NMR) przeznaczonego do analizy strukturalnej związków chemicznych oraz monitorowania postępu reakcji chemicznych w czasie rzeczywistym.

1. Parametry ogólne urządzenia

1. Nabiurkowy spektrometr NMR wykorzystujący **stały magnes** do generowania pola magnetycznego.
2. Natężenie pola magnetycznego odpowiadające częstotliwości rezonansowej protonów **60 MHz ($\approx 1,4$ T)**.
3. Urządzenie niewymagające dodatkowych systemów chłodzenia.
4. Zasilanie: **230 V / 50 Hz**.
5. Zakres temperatury pracy urządzenia: **minimum od 14°C do 28°C** otoczenia.
6. Konstrukcja urządzenia w formie **systemu jednoskrzynkowego**, w którym elektronika i magnes znajdują się w tej samej obudowie.
7. Maksymalna masa urządzenia: **do 60 kg**.
8. Urządzenie przenośne przeznaczone do pracy laboratoryjnej.

2. Obsługiwane jądra

Spektrometr musi być skonfigurowany do analizy NMR dla jąder:

- ^1H
- ^{13}C
- ^{19}F

System musi umożliwiać:

- automatyczne przełączanie między jądrami **bez ingerencji użytkownika lub ręcznego dostrajania**,
- możliwość **rozszerzenia systemu o dodatkowe jądra w przyszłości**.

3. Parametry spektroskopowe

Minimalne wymagania:

Rozdzielczość widmowa

- szerokość linii przy **50% wysokości sygnału** < 0,2 Hz
- szerokość linii przy **0,55% wysokości sygnału** < 7 Hz
- szerokość linii przy **0,11% wysokości sygnału** < 14 Hz

Czułość

- czułość dla jądra ^1H > **140:1** dla **1% etylobenzenu** przy pojedynczym skanie widma

Stabilizacja temperatury

- temperatura urządzenia / sondy ustawiona na **26,5°C**, co zapobiega parowaniu próbek i rozpuszczalników.

System blokady

- system **external hardware lock**, umożliwiający pracę z rozpuszczalnikami **niezdeuterowanymi**.

4. Tłumienie sygnału rozpuszczalnika

Urządzenie musi być wyposażone w wydajny system tłumienia sygnału rozpuszczalnika oparty o technikę **WET solvent suppression**.

Wymagania:

- standardowy test tłumienia: **20 mM sacharozy w wodzie**
- szerokość linii reszkowej < **4 Hz na wysokości protonu anomerycznego**.

5. Dostępne eksperymenty NMR

Spektrometr musi umożliwiać wykonywanie następujących eksperymentów.

¹H

- 1D
- eksperymenty paramagnetyczne
- 1D z odsprzęgnięciem ¹³C
- 2D COSY
- 2D TOCSY
- 2D JRES
- 2D DQF COSY
- 2D ROESY
- pomiar relaksacji **T1 (Inversion recovery)**
- pomiar relaksacji **T2 (CPMG)**
- monitoring reakcji
- tłumienie sygnału rozpuszczalnika (również dla wielu linii, z opcją odsprzęgnięcia ¹³C)

¹⁹F

- 1D
- 1D {¹H}
- 2D F-F COSY
- 2D FH-COSY
- 2D F-JRES
- monitoring reakcji

¹³C

- 1D

- 1D z odsprzęganiem ^1H i/lub ^{19}F
- DEPT
- APT
- HETCOR
- HSQC
- HMQC
- HMBC
- HSQC-ME.

6. System gradientów pola magnetycznego

Spektrometr musi być wyposażony w system impulsowych gradientów pola magnetycznego.

Minimalne wymagania:

- **3D PFG** dla sekwencji wybieranych gradientowo (gradient-selected sequences),
- możliwość wykonywania eksperymentów dyfuzyjnych,
- obsługa eksperymentów **DOSY**,
- maksymalna siła gradientu **> 0,5 T/m (50 G/cm)**,
- pole główne **B_0** oraz **gradienty poprzeczne względem osi otworu magnetycznego (bore)**.

7. Obsługa próbek

Spektrometr musi umożliwiać:

- pomiary w **standardowych probówkach NMR o średnicy 5 mm**,
- monitorowanie reakcji w czasie rzeczywistym.

Zestaw do monitorowania reakcji musi zawierać:

- **dwie szklane cele przepływowe**,
- zestaw złączy,
- **pompę perystaltyczną sterowaną programowo**.

8. Oprogramowanie i obsługa danych

Urządzenie musi być dostarczone wraz z komputerem sterującym oraz zainstalowanym fabrycznie oprogramowaniem umożliwiającym:

- sterowanie spektrometrem,
- akwizycję danych,
- przetwarzanie widm NMR.

Wymagania dodatkowe:

- widmo NMR wyświetlane **bezpośrednio po pierwszym skanie pomiaru**,
- kompatybilność plików danych z powszechnie stosowanymi programami analizy widm NMR,
- możliwość **zdalnej diagnostyki spektrometru przez łącze internetowe**,
- możliwość **zdalnej pomocy w konfiguracji, gromadzeniu i przetwarzaniu danych, tworzeniu skryptów oraz korzystaniu z zaawansowanych funkcji**.

9. Dostawa i uruchomienie

1. Dostawa urządzenia do siedziby zamawiającego.
2. Instalacja urządzenia.
3. Uruchomienie oraz kalibracja systemu.
4. Dostarczenie **zestawu instalacyjnego i kalibracyjnego**.
5. Urządzenie musi być **gotowe do użytkowania bezpośrednio po instalacji**.
6. Szkolenie użytkowników w zakresie obsługi urządzenia i oprogramowania (na miejscu lub w formie on-line).