

Capitolato tecnico 400 Mhz

draft

Spettrometro FT-NMR operante a 400 Mhz, con magnete attivamente schermato con foro di apertura di 54 mm, dalle seguenti caratteristiche minime:

1. Magnete attivamente schermato a basso consumo di elio (max 13 ml/h, 1 refill elio/anno), con almeno 14 cryoshim energizzate in fabbrica (non dal cliente), stabilità di campo < 4 Hz/h, con sistema di soppressione disturbi EM esterni fino al 99.9% di fattore di soppressione. Completo di transferline per rabbocco elio ed azoto e torrette di quench line.
2. Il magnete deve essere in collegamento continuo con server della fabbrica costruttrice per monitorare consumi elio ed azoto e inviare eventuali alert in caso di malfunzionamento
3. Console NMR 2 canali multireceiver (2 trasmettitori e 2 ricevitori), idoneo per NMR allo stato liquido e solido.
In particolare:
 - a. Amplificatore 500 Watt nell' intervallo 180-600 Mhz
 - b. Amplificatore 500 Watt nell'intervallo 15-600 Mhz
 - c. Preamplificatori basati su tecnologi GaAs a basso rumore e alta potenza
 - d. Due sistemi transceiver operante nell'intervallo 15-1280 Mhz con programmatore impulsi in grado di cambiare simultaneamente ampiezza fase e frequenza in max 12.5 ns
 - e. Sistema di generazione di 40 shim con shim system con almeno 36 shim
4. Amplificatore di gradienti di massimo 10 Ampere in grado di generare al probe almeno 50 G/cm
Routine di shimming automatico con fitting forma di riga
5. Sistema di controllo della T variabile con risoluzione 5 mK e stabilità di 10 mK per K di variazione della T del locale. Sistema di misurazione e regolazione *in situ* nel campione della variazione della temperatura mediante lettura dello spostamento del Chemical shift
6. Sonda NMR 5mm per misure in soluzione con le seguenti caratteristiche minime
 - Auto tuning e matching
 - Bobina a schermo attivo di gradienti in grado di generare, con max 10 Ampere, gradienti lungo di Z di almeno 50 G/cm
 - Intervallo di T: -150°C +150°C
 - Intervallo di frequenza: 1 H + [19F + 31P-109Ag], deve cioè coprire tutti i nuclei da 31p a 109Ag , oltre a 19F; 1H e 19F devono essere su due bobine diverse per massimizzare prestazioni in esperimenti 1H-19F di doppia risonanza
7. Sonda CP/MAS 4 mm automatizzata per misure allo stato solido
Caratteristiche:
 - rotore 4 mm (volume ca 80 ul per alta sensibilità) - velocità 15.000 Hz
 - VT range: -80+200°C
 - Intervallo frequenza 1H-19F e tutti i nuclei da 31P a 15N
 - Tuning e matching automatico
 - Automatic MAS setting
 - Compatibilità con shuttle per automazione allo stato solido
 - Espulsione automatica del campione
 - Kit di almeno 3 rotori, preparazione campioni e standard
 - Sistema shimming automatico
8. MAS unit per misure MAS, con regolazione velocità rotazione < 0.1%
9. Campionatore automatico 24 posizioni, con relativi spinners 5 mm.
Compatibile con shuttle MAS (almeno uno in dotazione).

Software avanzato di automazione che consenta, oltre a predisposizione esperimenti manuale, una determinazione automatica degli esperimenti volti alla caratterizzazione di piccole molecole (in base alla complessità spettrale) e alla minimizzazione del tempo di acquisizione necessario per la determinazione di una struttura di piccole molecole

10. Host computer Windows 11, con monitor 24”
11. Licenza software per acquisizione e processing dati NMR, comprendente routine per NUS e sequenze NoaH multireceiver. Deve comprendere tutte le più moderne routine di processing (compresi algoritmi basati su AI per correzione linea di base, deconvoluzione, signal determination)
Deve essere fornito un nr illimitato di licenze di processing per gli utenti dell’ateneo
12. Sistema automatico di auto calibrazione, comprendente campione validato per calibrazione analisi quantitativa, calibrazione T, impulsi , potenze e shim , con generazione automatica report e correzione automatica potenze
13. Pacchetto di licenze perpetua di *Mnova mestrelab* comprendente:
 - processing dati NMR (visualizza, elabora, analizza e crea report dei tuoi dati NMR 1D e 2D)
 - Predizione (previsione accurata degli spettri NMR dalla struttura)
 - Verifica (verifica della struttura basata su dati NMR e/o LC/GC/MS)
 - qNMR (strumento di analisi NMR quantitativa)
 - IUPAC Name (genera il nome IUPAC da una struttura molecolare)
 - MS (elabora, analizza e crea report dei dati LC-MS e GC-MS)
 - ElVis (visualizza, elabora, analizza e crea report di dati elettronici e vibrazionali)
 - archiviazione di strutture molecolari, dati analitici NMR e LC-MS e GC-MS
 - Browser collegato direttamente al software di acquisizione

SERVIZI inclusi

14. Installazione, con liquidi criogenici per raffreddamento e quench pipeline
15. Sistema automatico di autodiagnosi e diagnosi remota sulla console
16. Servizio di assistenza tecnica NMR basato nel lazio
17. Garanzia: 3 anni, con visita annuale di OQ e refill elio (elio incluso)
18. 1 gg di training tecnico e 2 gg training applicativo on site