



investiamo nel vostro futuro



UNIVERSITÀ
DEGLI STUDI DI BARI
ALDO MORO

Dipartimento di Chimica

Via E. Orabona, 4
70126 - Bari

FORNITURA DI UNA STRUMENTAZIONE:

NMR PER STATO LIQUIDO E STATO SOLIDO

REFERENTE TECNICO DELLA FORNITURA: GIUSEPPE COLAFEMMINA

IMPORTO COMPLESSIVO DELL'APPALTO: € 330.578,51OLTRE IVA

Firma

e-mail: colafemmina@chimica.uniba.it

Data:

Upgrade Spettrometro NMR Inova400

PREMESSA

La strumentazione dovrà essere del livello più elevato consentito dall'attuale tecnologia di Risonanza Magnetica Nucleare e dovrà prevedere la possibilità di eseguire implementazioni e potenziamenti futuri. Tutta la strumentazione fornita dovrà tassativamente comprendere tutti le parti *hardware* e *software* di ultima generazione presenti sul mercato, al momento della consegna, al fine di offrire prestazioni allo stato dell'arte, in grado di soddisfare le esigenze di ricerca presenti e future nel campo della risonanza magnetica nucleare ad alta risoluzione su campioni liquidi e solidi. La strumentazione dovrà inoltre essere conforme agli standard di qualità previsti dalla certificazione ISO-9001 e alle vigenti normative europee in materia di sicurezza.

La soluzione proposta deve inoltre essere compatibile con il magnete superconVARIAN 400/54 Family type 3 versione 4 aprile 1995 e le tre sonde già presenti nel laboratorio n. 026, piano seminterrato del Dipartimento di Chimica dell'Università di Bari, Campus - via Orabona, 4. Sono presenti una sonda diretta 400 ASWPFG 5mm con configurazione diretta per liquidi, una sonda Z-SPEC IDG400-5 con configurazione inversa per liquidi e una sonda "400MHz VariableTemp CP-MAS TLT probe" per solidi.

In particolare, al fine di evitare possibili malfunzionamenti nel magnete è richiesta la compatibilità tra le bobine di cryoshims esistenti ed il nuovo alimentatore delle stesse.

La configurazione minima della strumentazione deve includere le seguenti parti:

1. CONSOLE

La console deve disporre di canali di radiofrequenza, sistema di 'lock', unità per gradienti di campo, ricevitore, unità di controllo temperatura e computer di acquisizione.

1.1 Canali di Radiofrequenza

La console deve essere configurata con 3 canali a radiofrequenza paralleli e con le seguenti caratteristiche:



- Ogni canale deve essere in grado di gestire trasmissione, osservazione e disaccoppiamento(modulato e ad impulsi).
- Ogni canale deve essere fornito di un amplificatore di radiofrequenza di tipo lineare. Due amplificatori devono permettere di amplificare radiofrequenze nell'intervallo 300 - 500MHz con una potenza nominale non inferiore a 100W. Il terzo canale deve contenere un amplificatore che possa amplificare frequenza nell'intervallo 6-220 MHz con potenza nominale non inferiore a 300W.
- Ogni canale deve poter realizzare esperimenti di disaccoppiamento, eccitazione selettiva, 'spinlock' e 'reverse detection'. Devono inoltre essere presenti hardware e software necessari per eseguire impulsi sagomati (shapedpulses) anche di forma complessa. Specificare in sede di offerta le caratteristiche della memoria, presente nella console, preposta a generare tali impulsi.

1.2 Sistema di 'Lock'

Deve essere presente un circuito di lock controllato da computer, i cui parametri siano modificabili tramite software.

1.3 Unità per Gradienti di Campo

E' necessaria la presenza di due unità per generare ed amplificare gradienti di campo lungo l'asse Z.

Il primo amplificatore deve fornire almeno 10 Ampere ed essere in grado di produrre sui probe esistenti almeno 60 G/cm.

L'unità deve essere integrata con un opportuno software che consenta il 'gradientshimming' 1D e 3D sia su 1H che su 2H.

Il secondo amplificatore deve essere specificatamente dedicato ad applicazioni di diffusione a forte gradiente e compatibile con la sonda richiesta nel seguito.

L'amplificatore deve fornire almeno 120 A, 50 A con un *duty cycle* del 10%, 25 A con un *duty cycle* del 40% e 10 A in continua.

1.4 Ricevitore

Al fine di prevenire possibili artefatti di sincronizzazione il ricevitore deve essere equipaggiato con un solo ADC ad alta velocità con frequenza di campionamento di almeno 80 MHz. Il ricevitore deve inoltre eseguire filtraggio digitale e sovracampionamento in tempo reale.



1.5 Unità di Controllo Temperatura

Deve essere fornita un'unità per il controllo della temperatura che consenta di eseguire esperimenti a temperatura variabile nell'intervallo da $-150\text{ }^{\circ}\text{C}$ a $+200\text{ }^{\circ}\text{C}$ (stabilità $\pm 0.1\text{ }^{\circ}\text{C}$). Il sistema deve comprendere tutti gli accessori necessari per eseguire esperimenti compresi in tale intervallo e, pertanto, deve anche includere un dewar per azoto liquido ed uno scambiatore.

1.6 Computer di Acquisizione

La console deve essere fornita di un proprio processore di acquisizione collegato alla stazione di lavoro tramite scheda ethernet. Specificare in sede di offerta le caratteristiche tecniche del processore impiegato.

2. CARATTERISTICHE TECNICHE PER LE APPLICAZIONI ALLO STATO SOLIDO

La console deve essere compatibile con la sonda MAS descritta precedentemente e l'unità pneumatica di rotazione attualmente presenti.

Si precisa che attualmente la sonda MAS succitata non è funzionante avendo problemi di rotazione. Pertanto è richiesta la revisione in fabbrica della stessa sonda in modo da rispettare le specifiche tecniche rilasciate dall'azienda costruttrice. Inoltre, per le stesse ragioni, si richiede un controllo dell'unità pneumatica di rotazione attualmente presente in sede.

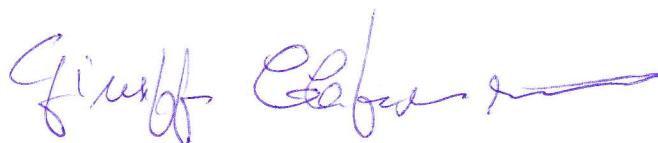
Oltre a ciò è richiesta la fornitura di una sonda MAS H/F/X/Y con X compresa nelle frequenze di risonanza tra ^{31}P e ^{13}C ed Y con frequenze tra ^{13}C e ^{15}N .

La sonda deve avere statore che minimizzi il segnale di fondo del ^{19}F .

Oltre ad esperimenti monodimensionali con osservazione di ^1H , ^{19}F ed eteronuclei compresi nell'intervallo ^{31}P - ^{15}N , è necessario che la sonda possa eseguire esperimenti di osservazione di ^1H con disaccoppiamento di ^{19}F e viceversa, nonché esperimenti tripla risonanza combinazione di ^1H , ^{19}F e un nucleo compreso tra ^{15}N e ^{31}P .

A tal fine è richiesta la fornitura di tutti i filtri necessari all'opportuna separazione dei segnali ^1H e ^{19}F .

Con l'eventuale futura aggiunta di un 4° canale di radiofrequenza la sonda deve essere in grado di eseguire esperimenti eterocorrelati XY.



Insieme alla sonda deve essere anche fornito un kit di parti (tappi, rotori, estrattori, porta rotori e attrezzi utili per il riempimento dei rotori) necessari per l'uso ottimale della stessa. Il kit deve comprendere un minimo di 5 rotori.

Deve essere inoltre fornito un set di standard per il controllo delle specifiche della sonda.

Lo strumento deve anche essere dotato di preamplificatori adatti allo studio di campioni allo stato solido.

3. APPLICAZIONI in DIFFUSIONE

Lo spettrometro deve essere fornito di un sistema per lo studio di diffusione in campioni liquidi.

Oltre all'amplificatore di gradienti precedentemente richiesto è necessario dotare lo strumento di una sonda multinucleare da 5 mm che possa generare gradienti fino a 2.500 G/cm.

La sonda deve essere ottimizzata per lo studio del ^1H , ma deve essere in grado di lavorare anche con ^{31}P , ^{13}C , ^{23}Na , ^{14}N e ^2H .

La sonda deve essere corredato di un sistema di raffreddamento ad acqua per evitare surriscaldamento della bobina di gradiente.

Deve anche essere fornito un set di standard per il controllo delle specifiche della sonda.

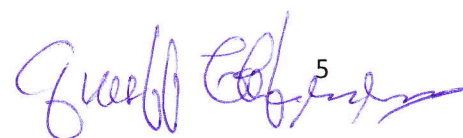
4. STAZIONE DI LAVORO

La stazione di lavoro deve prevedere un 'computer host' operante in ambiente Linux di ultima generazione ed un adeguato software per la gestione dello spettrometro.

Sono richieste le seguenti caratteristiche minime:

4.1 Hardware e Periferiche

- Processore a 4 core.
- Memoria RAM di almeno 8 GB.
- Uno o più dischi fissi di capacità non inferiore a 500 GB.
- Scheda grafica con memoria di almeno 1GB VRAM
- Almeno due schede fast-ethernet, di cui una dedicata al collegamento con la console e l'altra alla connessione con l'esterno (reti, etc.).
- Monitor a colori flat panel di almeno 24" full HD.
- Lettore DVD +/- RW 16x.
- Stampante laser a colori di formato A4 con scheda di rete.



4.2 Software

- Software di acquisizione, elaborazione e stampa dei dati NMR, anche in modo automatico.
- Licenza di software per l'elaborazione e la stampa dei dati .Indicare la presenza di licenze aggiuntive.
- Libreria contenente le più moderne sequenze di impulsi che preveda anche applicazioni di diffusione ad alta risoluzione (2D e 3D DOSY), di spettroscopia FAST a n-D (Hadamard).
- Programmi che permettono NMR quantitativo (qNMR) in modo semplice ed accurato.
- Software specifici per l'acquisizione spettrale di campioni allo stato solido.
- Software per la programmazione di sequenze d'impulsi.
- Manuali descrittivi delle sequenze utilizzati nel software. Software di auto-diagnosi utilizzabili anche con connessione remota.
- Compatibilità del nuovo software con tutti i files già presenti (o acquisiti) nella vecchia console in nostro possesso.
- Manuale in linea completo ed aggiornato.

E' richiesta inoltre la possibilità di leggere ed elaborare senza alcuna limitazione tutti i dati e le *macro* già ottimizzate e presenti nell'attuale computer di acquisizione.

5. GRUPPO di CONTINUITA'

Gruppo di continuità che permetta lo spegnimento regolare dello strumento in caso di interruzione di corrente elettrica.

6. SERVIZI

La Ditta aggiudicataria della fornitura dovrà offrire i seguenti servizi:

6.1 Addestramento

Si richiede un programma d'addestramento alla manutenzione dello strumento ed uno al suo impiego sullo stato liquido e solido.

Quest'ultimo dovrà essere tenuto da un tecnico applicativo in loco e dovrà avere la durata di almeno cinque giorni.

6.2 Assistenza Tecnica e Manutenzione

La sede di assistenza tecnica NMR deve essere presente in Italia. Lo strumento deve essere fornito di tutto l'hardware ed il software necessario al controllo remoto dello stesso.

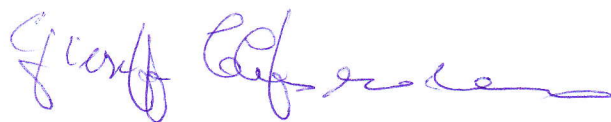
 6

6.3 Garanzia

La garanzia di buon funzionamento dovrà coprire un periodo di almeno ventiquattromesi successivi alla data di collaudo favorevole della strumentazione. Tale garanzia deve comprendere eventuali lavori, riparazioni e/o sostituzione di parti (escluse le parti consumabili) necessari al funzionamento ottimale della fornitura.

6.4 Ritiro

La ditta aggiudicataria si impegna a propria cura e spesa, al ritiro di tutti i pezzi che verranno sostituiti o non più utilizzati nella nuova configurazione.

A handwritten signature in blue ink, appearing to read "Giovanni...", is located in the center-right of the page.