

2022 年双一流建设专项资金采购

中药学（蒙药学）双一流学科建设项目

第 1 包：

序号	标的名称	数量	单位	是否接受进口	预算金额 (万元)	核心产品
1	X 射线单晶衍射仪	1	台	是	304	是
2	傅立叶变换红外光谱仪	1	台	是	50	是

标的内容	X 射线单晶衍射仪		
数量	1	单位	台
功能和质量要求（采购标的需求满足的性能、材料、结构、外观、安全、或者服务内容和标准）	一、工作条件 1.1 电源电压 AC 220V$\pm$ 10% 50Hz 单相； AC 380V $\pm$10% 50Hz 三相； 1.2 工作温度 15-40℃； 1.3 相对湿度 $\leq$80%； 1.4 仪器运行的持久性：长时间连续工作； 二、功能与组成 1. ★仪器功能 主要用于在化学结晶学领域准确、快速测定晶体结构，区分和确定晶体空间结构的目的。同时，能满足小晶体、质量较差晶体的结构解析工作等。 2. ★仪器主要组成部件 1) X 射线发生器； 2) 高精度 Kappa 测角仪； 3) 二维面探测器； 4) 多层膜聚焦镜； 5) 数据处理软件；		

6) 低温附件。

三、技术性能指标

3.1 X 射线光管及射线防护

3.1.1 高强度微焦点 Cu 光源，功率： $\geq 50\text{W}$

3.1.2 焦点尺寸： $\leq \phi 50\text{ }\mu\text{m}$ ；

3.1.3 稳定度（管电压，管电流）： $\leq \pm 0.05\%$ （电源电压波动 10%以内）；

3.1.4 X 射线快门：转动快门；

3.1.5 安全保护部件：靶冷却水异常；发生器过载异常；管电压、电流异常等报警和紧急停止开关、漏电制动器等功能。

3.1.6 X 射线防护罩：外部泄漏 X 射线量在 $1\text{ }\mu\text{Sv/h}$ 以下

3.2 多层膜聚焦镜

3.2.1 二维人工多层膜聚焦镜系统

3.2.2 光束准直系统

3.3 高精度 Kappa 测角仪

3.3.1 测角仪采用光学编码器方式

3.3.2 ϕ 轴： $\geq 360^\circ$ 旋转，重复精度 $\leq 0.001^\circ$

3.3.3 ω 轴/ 2θ ： $\geq -180^\circ -180^\circ$ 旋转，重复精度 $\leq 0.0002^\circ$

3.3.4 Kappa： $\geq -175^\circ -175^\circ$ 旋转，重复精度 $\leq 0.001^\circ$

3.3.5 球差保证：对心以后，任何移动，球差不超过 7 微米

3.4 二维面探测器

3.4.1 采用全新 HPAD 电荷积分像素阵列探测技术

★3.4.2 探测器类型：高分辨 X 射线光子直读探测器，无需耦合，没有缩锥比

★3.4.3 像素尺寸： $\leq 100\text{ }\mu\text{m} \times 100\text{ }\mu\text{m}$

3.4.4 有效面积： $\geq 77\text{ mm} \times 38\text{ mm}^2$

3.4.5 读数动态范围：最大 31 Bit

3.4.6 读数时间： $\leq 3.7\text{ms}$

3.4.7 具备无快门（Shutter free）功能

3.4.8 探测器采用风冷模式制冷，且无需持续通保护气体

3.4.9 检测量子效率（DQE）对 Cu, Mo 光源均 ≥ 0.95 ，无电荷分享噪音

3.4.10 同时具备单光子计数和积分计数模式

	3.4.11 探测器到样品的距离马达软件控制自动可调 3.5 低温附件 3.5.1 软件控制连续变温：$\geq 80-400\text{K}$ 3.5.2 控温精度：$\leq \pm 0.1\text{K}$ 3.5.3 支持软件编程，自动序列测试 3.5.4 含 60L 低温杜瓦一个 3.6 标准样品及载晶座 3.6.1 随机带 Standard Sample Cytidine ≥ 1 颗 3.6.2 标准 XYZ goniometer head 载晶座 ≥ 3 个 3.7 软件部分 ★3.7.1 数据收集过程中全自动数据还原 ★3.7.2 数据收集过程中 AutoChem 全自动结构解析无需人工干预 3.7.3 数据收集和结构解析均为正版授权软件不限制安装，免费更新 ★3.7.4 支持小分子晶体本地数据库建立和自动检索 3.8 仪器控制和数据采集系统 3.8.1 数据采集系统：OS : WIN10 英文 CPU: I7 内存：8G 硬盘：1T 显示器：27” 显卡：2G 独立显卡 光驱：8X
配套标需要的设备、备件、耗材等	1. 配套及附件完整性要求 1.1 ★标准配件 1) 为满足仪器安装验收所需测试标准品。 1.2 配套设备

标的内容	傅立叶变换红外光谱仪		
数量	1	单位	台
功能和质量要求（采购标的需求满足的性能、材料、结构、外观、安全、或者服务内容和标准）	一. 红外主机主要参数 ★1. 分辨率：不低于 0.25cm^{-1}。可根据测试需要，将光谱分辨率自由设置成 0.25cm^{-1}，0.5cm^{-1}，1cm^{-1}，2cm^{-1}，4cm^{-1}，8cm^{-1}，16cm^{-1}等 ★2. 信噪比：不低于 53000:1（4cm^{-1} 光谱分辨率，1 分钟扫描，峰-峰值，KBr 窗片，无需吹扫） 3. 等效峰-峰值噪声 $\leq 7.89 \times 10^{-6}\text{Abs}$（$4\text{cm}^{-1}$ 光谱分辨率，1 分钟扫描，峰-峰值，KBr 窗片，无需吹扫） 4. 光谱范围：7700~350cm^{-1} 5. 波数重复性精度：$\pm 0.0025\text{cm}^{-1}$ ★6. 光源：高强度长寿命 SiN 陶瓷光源，空气冷却。红外光源质保 10 年 7. 30° 角入射迈克尔逊干涉仪，能量利用率高 8. 线性导轨动镜驱动机构，可实现高精度大载荷的直线往复运动 9. 高级动态准直功能，可以在开机自检和实际光谱扫描过程中实现自动准直和实时准直 10. 分束器：中红外镀锗双面防潮镀层 KBr 分束器 ★11. 激光器：高单色性高稳定 He-Ne 激光器，波长和功率长期稳定。激光器质保 5 年 ★12. 检测器：半导体控温型高灵敏度 DLATGS 检测器，内置电子温度调节装置以保证良好的稳定性 13. 检测器封装采用永久防潮的 KRS-5 光学窗片，确保不会因受潮导致检测器损坏 14. 可升级到双检测器，仪器内部可同时安装两个检测器，软件选择，自动切换 15. 可升级高速扫描功能，实现每秒钟 20 张完整光谱（7800~350cm^{-1}）的高速扫描 16. 样品室光学窗片采用新型的特氟龙镀层 KBr 光学窗片，既保证长期可靠的防潮性能，也同时保证相对高的光通量。也可选择使用防潮型 KRS-5 光学窗片 17. 样品室光学窗片可方便地由用户自行更换，无需使用工具 18. 仪器有外在明显的湿度指示灯（硬件）和湿度指示剂实时监控湿度，并		

	在软件中有湿度实时指示 ★19. 可升级仪器内置长寿命自动电子除湿装置，无需定期更换干燥剂。电子除湿装置采用高分子固态电解膜技术，无噪音，免维护，不产生液态水，无需定期排水或清理 20. 通讯接口：USB 3.0/2.0，即插即用，无需复杂的网络联接设置，对工作站 PC 无任何联网的软硬件要求 21. 软件功能模块：包括光谱扫描、光度测定、定量（单组份/多组分同时定量）、时间程序测定、再解析、简单宏程序、向导式软件模块等 22. 数据处理功能：包括四则数学运算、归一化、基线校正、平滑、导数、截断、连接、插值、波数-波长转换、X 轴校正、时间-温度转换、峰检测、选点、膜厚/池厚计算、数据集运算、纯度计算、解卷积、傅立叶变换、K-M 变换、K-K 变换、高级 ATR 校正、分峰拟合、大气校正、3D 数据处理、3D 数据抽取等 23. 自动分析助手：包括药典报告程序（定性鉴别）；异物分析程序（混合物分析，自动解析可能的主成分和次要成分，无需提前提供组分种数）；食品添加剂鉴别程序；纯度判定程序（相似度计算） ★24. 向导式软件模块：提供 23 个标准应用的工作流，只需简单选择分析目的和所用附件，不用设置任何参数，即可实现一键测量 25. 定量模块：可以用峰高、峰面积、峰比率等建立多点标准曲线定量；计算得到的浓度可以自动应用到用户自定义的方程中；可自动进行合格与否的判定；可进行 CLS 多变量统计分析建模；可升级 PLS 多变量统计分析建模 26. 光度测定模块：可直接自动读取指定峰位的峰高、峰面积、峰比率数值；读取值可以自动应用到用户自定义的方程中；可自动进行合格与否的判定 27. 光谱检索功能：可基于光谱检索，也可基于峰检索、文本检索或组合检索；用户可自建库（支持中文路径）；可使用用户自建谱库，也可使用 Sadtler 谱库、S. T. Japan 等第三方商品谱库 28. 软件配备 11500 张以上的标准谱库，有正版授权的 USB 加密锁。包括溶剂、药品、食品添加剂、农业化学品、污染物、聚合物、有机化合物、无机物等多种标准谱库，其中聚合物谱图不少于 2000 张 29. 打印功能：可实现所见即所得的简单屏幕视图打印；可以编辑任意页面布局的高级打印模板并调用模板打印 30. 可升级时间程序测定模块：可以按照设定的时间间隔连续扫描光谱，并按照用户指定的峰高、峰面积、峰比率、浓度等生成时间序列数据
--	--

31. 宏程序模块：标配向导式软件（标准宏程序模块）；可通过鼠标拖拽快速自建简单宏程序；可以方便的通过简单宏程序创建标准化操作流程(SOP)；生成的宏程序可以在 Windows 系统桌面上直接双击启动；可升级使用 Visual BASIC 语言生成和编辑传统宏程序
32. 大气校正功能：可以在扫描过程中自动执行大气校正，以消除水汽和二氧化碳的干扰；可以对已存在的光谱数据进行大气校正的后处理
- ★33. 数据格式兼容性：可以直接打开至少三家主流红外光谱仪厂家标准格式的原始光谱数据文件；可以直接打开原厂操作软件生成的原始光谱数据文件；可以导入导出通用光谱格式 JCAMP (*.dx, *.jdx) 文件，以及纯文本格式 ASCII (*.txt, *.asc) 文件，以方便打开其他程序得到的光谱原始数据或在第三方软件上直接导入使用
34. 硬件监控：开机自诊断，初始化检查光路、电路及信号系统的状态；实时状态监控，自动检查光源和激光器的开关状态、干涉仪内部的湿度、安装在样品室的附件信息、分束器的类型；自动校正激光波长；自动记录光源和激光器的已使用小时数；自动提示下次定期检查的建议日期
35. 软件支持附件自动识别和参数自动优化功能
36. 仪器确认程序：可自动执行的仪器性能确认程序，符合中国药典，欧洲药典，日本药典，美国药典和 ASTM 标准等标准和法规的要求
37. GLP/GMP 兼容性：符合 GLP/GMP 规范要求，树形数据结构的审计追踪功能，操作记录和数据记录（log）自动保存，禁止同名文件的覆盖
38. ER/ES 法规兼容性：软件平台保证数据安全性和数据完整性，网络版软件可严格满足 ER/ES（电子记录/电子签名）法规，可按用户分组设定权限，符合 FDA 21 CFR Part 11 和 PIC/S 法规要求
39. 可提供全套 IQ/OQ 认证服务
40. 红外主机可兼容第三方红外附件（如原位漫反射附件、变温透射附件、光谱电化学附件，原位探头，可视 ATR，长光程气体池等），并可外接红外显微镜实现显微红外分析
41. 样品室尺寸不小于 200(W)×230(D)×170(H) mm，以方便兼容多种红外附件
42. 可联用红外显微镜实现小至 10 μm 的微小样品和微区的显微红外分析，软件控制自动切换光路
43. 可联用热分析仪（TGA 或 STA），实现 TG-IR 实时在线联用分析（热红联用）

	★44. 可以使用 EDX-FTIR 联用分析软件进行 EDXRF（能量色散 X 射线荧光光谱仪）光谱和 FTIR 光谱数据的综合联用分析，即用同一个软件可对 FTIR 数据和 EDXRF 数据进行直接联用综合分析并给出分析结果 45. 可升级自动吹扫功能，实现红外主机干涉仪、检测器、样品仓等各关键部位的氮气或干燥空气连续吹扫，以最大程度消除水汽和二氧化碳的干扰。各路吹扫气可独立控制 二. 附件 1. 固体制样包：包括小型油压机（2 吨），7mm 压片模具，固定环，插板，玛瑙研钵和研杵，50 克 KBr 粉末；适用于粉末样品或易于制成粉末的固体样品的压片制样分析 2. 单次反射 ATR 附件：用于红外光谱仪主机。金刚石晶体，全反射光学设计，可实现 $4000\sim 400\text{cm}^{-1}$ 全部中红外波段的测量；适用于粉末、块状固体、片状固体、液体、粘稠油类、膏体、纤维、塑料、橡胶、纸张、包装膜等各类样品 3. 聚苯乙烯（PS）标准薄膜：带可追溯的证书文件；用于仪器的性能确认 4. 配套数据采集系统一套
配套标需要的设备、备件、耗材等	配套及附件完整性要求 1. 固体制样包：包括小型油压机（2 吨），7mm 压片模具，固定环，插板，玛瑙研钵和研杵，50 克 KBr 粉末；适用于粉末样品或易于制成粉末的固体样品的压片制样分析 2. 单次反射 ATR 附件：用于红外光谱仪主机。金刚石晶体，全反射光学设计，可实现 $4000\sim 400\text{cm}^{-1}$ 全部中红外波段的测量；适用于粉末、块状固体、片状固体、液体、粘稠油类、膏体、纤维、塑料、橡胶、纸张、包装膜等各类样品 3. 聚苯乙烯（PS）标准薄膜：带可追溯的证书文件；用于仪器的性能确认。 4. 配套数据采集系统一套

说明：1. 标注“★”的技术参数为关键指标，一项不满足为将被视为未实质性满足招标文件要求按投标无效处理；

2. 标注“▲”技术参数为重要指标，出现负偏离时加重扣分；

3. 无标注为一般技术参数，出现负偏离时正常扣分。