



„Dostawa pakietu licencji na oprogramowanie od analizy danych z miareczkowania potencjometrycznego oraz z miareczkowania spektrofotometrycznego dla Instytutu Nauk o Zdrowiu UO”

Opis przedmiotu zamówienia

Załącznik nr 1

Przedmiotem zamówienia jest dostawa jednego [1] pakietu licencji dożywotnich na oprogramowanie do: analizy danych uzyskanych z miareczkowania potencjometrycznego oraz analizy danych uzyskanych z miareczkowania spektrofotometrycznego.

Oprogramowanie do: analizy danych uzyskanych z miareczkowania potencjometrycznego; obliczenia wartości stałych trwałości oraz rozkładu stężeń form kompleksowych, musi posiadać co najmniej niżej wymienione funkcje:

1. wyprowadzanie stałych równowagi, stałych trwałości, z danych eksperymentalnych,
2. wizualizacja dopasowania modelu do danych eksperymentalnych,
3. wprowadzenie danych dla min. 4 różnych reagentów,
4. obliczenia dla elektrody pH i emf,
5. obliczenia dla kwasu dwuzasadowego
6. obliczenia dla kompleksów typu metal-ligand,
7. obliczenia dla kompleksów ternarych,
8. obliczenia dla miareczkowań kompetycyjnych,
9. dane wejściowe w postaci plików o rozszerzeniu: txt, csv,
10. wybór jednostek dla danych wejściowych – stężeń – w mmolach lub mol/L,
11. wprowadzanie danych: potencjał elektrody, stężenia reagentów, objętości reagentów, wartości błędów – jest monitorowane pod względem kompletności,
12. kontrola danych przed obliczeniami: dane są sprawdzane pod kątem wartości domyślnych przed jakimikolwiek obliczeniami,
13. wyniki obliczeń podawane jako log β ,
14. obliczenia i wizualizacja stężeń wolnych jonów metalu i liganda, stężeń każdej formy kompleksowej oraz ewentualnych, zadanych przez użytkownika, form hydrolitycznych,
15. opcja wprowadzenia ładunków form kompleksowych,
16. zapis modelu obliczeniowego, który można następnie przywołać dla kolejnych danych eksperymentalnych,
17. wykonywanie diagramów kompetycji dla różnych systemów za pomocą tej aplikacji lub bezpłatnego dodatkowego oprogramowania.

Oprogramowanie do: analizy danych z miareczkowania spektrofotometrycznego; obliczenia wartości stałych trwałości kompleksów, musi posiadać co najmniej niżej wymienione funkcje:

1. obliczenia na podstawie danych spektrofotometrycznych uzyskanych za pomocą technik spektroskopowych: w zakresie UV-Vis, podczerwieni, Ramana, luminescencji i fluorescencji,
2. obróbka danych uzyskanych za pomocą miareczkowania lub badania zestawu pojedynczych próbek (batch),
3. włączanie pomiarów pH jako dodatkowych do miareczkowania i batchy,
4. automatyczna aktualizacja doliczonych stałych trwałości,
5. obliczenia stałych następnych i kumulatywnych,
6. analiza głównych składowych,
7. eksport danych (w postaci utworzenia pliku lub kopiowania danych do schowka),
8. interaktywne dopasowanie danych eksperymentalnych do obliczanej symulacji.