

PLEC DE PRESCRIPCIONS TÈNIQUES QUE REGEIX EL SUBMINISTRAMENT D'UN DIFRACTÒMETRE DE RAIGS-X DE POLS, DETECTOR D'ÀREA I PROGRAMES PER A LA INTERPRETACIÓ I TRACTAMENT DE DADES PER AL SERVEI DE RECURSOS CIENTÍFICS I TÈCNICS DE LA UNIVERSITAT ROVIRA I VIRGILI (URV), MITJANÇANT LOTS

LOT 1: DIFRACTÒMETRE DE RAIGS-X DE POLS

LOT 2: DETECTOR D'ÀREA

LOT 3: PROGRAMES PER A LA INTERPRETACIÓ I TRACTAMENT DE DADES

1. LOT 1 DIFRACTÒMETRE DE RAIGS-X DE POLS

1.1. Objecte del contracte:

L'objecte del present lot és el subministrament d'un equip de difracció de raigs-X de pols que permeti l'adquisició de dades en mode reflexió i transmissió.

1.2. Característiques tècniques de l'equip

Les característiques tècniques de l'equip ofert hauran de ser degudament documentades per part del licitador.

Cal que el licitador porti imatges de la configuració completa de l'equip descrit, així com d'aquelles seccions i/o accessoris que consideri convenient, en el sobre corresponent a l'oferta econòmica (sobre C).

Totes les especificacions tècniques relacionades són de mínims i per tant, d'obligat compliment.

Els requisits mínims que ha de complir l'equip són els següents:

1.2.1. General

- El difractòmetre s'oferirà com un sistema completament funcional, complet i instal·lat.
- El difractòmetre haurà de ser operable mitjançant la xarxa o internet.
- El difractòmetre haurà de permetre el diagnòstic remot basat en la xarxa o internet.
- El difractòmetre ha d'admetre geometries de Bragg-Brentano i de feix paral·lel amb els accessoris opcionals adequats.
- El sistema ha de ser totalment compatible amb les directrius CE:
 - o Directiva de maquinària (2006/42 CE)
 - o Equipament elèctric (2006/95/CE)
 - o Compatibilitat electromagnètica (2004/108/CE)



Codi de verificació: 7d9109ba1e6e71cf

Per a la verificació del següent codi podrà connectar-se a la següent adreça:
<http://contractaciopre.urv.cat/licitacion/verificadorCopiaAutentica.do?codigoVerificacion=7d9109ba1e6e71cf>

- El sistema ha de mostrar un marcat CE actualitzat, una declaració de conformitat CE actualitzada i tota la documentació requerida.
- El difractòmetre haurà de tenir l'aprovació, segons la legislació espanyola, com a equipament de radiacions ionitzants EXEMPT de ser declarat instal·lació radioactiva.
- El difractòmetre estarà connectat a un PC complet amb Windows-10 o superior amb prou capacitat d'emmagatzematge i memòria RAM (RAM >16Gb, SSD >500Gb) per fer córrer els programes de mesura i gestió de l'equip així com els programes d'avaluació de dades i tractament.

1.2.2. Cabina de raigs-X

- Els orificis per a la introducció de cables i canonades han d'estar homologats d'acord amb la normativa espanyola sobre radiacions ionitzants sense trencar l'estanquitat de la cabina.
- La cabina ha d'allotjar en el seu interior l'electrònica de control tant del difractòmetre com de les cambres de temperatura.

1.2.3. Tub de raigs-X i generador

- El corrent del generador de raigs-X ha de ser de tenir com a valors mínim i màxim de 5 i 60 mA seleccionables en passos de 1mA, amb una estabilitat millor que $\pm 0.005\%$ per a $\pm 10\%$ de fluctuacions de la xarxa.
- El voltatge del generador de raigs-X ha de ser de tenir com a valors mínim i màxim de 20 i 60 kV seleccionables en passos de 1kV, amb una estabilitat millor que $\pm 0.005\%$ per a $\pm 10\%$ de fluctuacions de la xarxa.
- La configuració dels kV i mA ha de poder ajustar-se mitjançant software.
- Tub de raigs-X de tipus ceràmic de radiació de Cu de focus fi i de 2.2 Kw de potència.

1.2.4. Goniòmetre

- El goniòmetre serà vertical amb configuració theta-theta (θ - θ).
- El goniòmetre cal que tingui un mecanisme d'accionament lliure de manteniment.
- El goniòmetre cal que tingui un interval angular de 360° (sense accessoris).
- El goniòmetre cal que tingui un interval de mesura de $-110 \leq 2\theta \leq 168^\circ$, en funció dels accessoris.
- La mida de pas mínima ha de ser de com a mínim 0.0001° .

1.2.5. Òptica primària i secundària



Codi de verificació: 7d9109ba1e6e71cf

Per a la verificació del següent codi podrà connectar-se a la següent adreça:
<http://contractaciopre.urv.cat/licitacion/verificadorCopiaAutentica.do?codigoVerificacion=7d9109ba1e6e71cf>

- El sistema cal que incorpori l'òptica necessària per fer mesures en reflexió i transmissió amb geometria de Bragg-Brentano i geometria de feix paral·lel.
- El sistema cal que incorpori els elements necessaris (slits, knifes, ...), per analitzar capil·lars en mode transmissió i reduir la difusió de l'aire a angles baixos.
- L'òptica primària cal que tingui un mirall per a l'òptica paral·lela, finestres fixes intercanviables i variables.
- L'òptica secundària cal que tingui un col·limador de feix paral·lel, finestres fixes intercanviables i variables.
- El sistema cal que tingui un reconeixement de tots els components de l'òptica primària en temps real i totalment automàtic.

1.2.6. Plataforma de portamostres

- Cal que tingui un suport de mostres en capil·lar, amb motor pas a pas i totalment controlat per software. Aquest suport cal que sigui compatible amb el capçal goniomètric de HUBER 1006, ja existent al laboratori.
- El sistema carregador de mostres ha de ser controlable totalment per software, amb velocitat de rotació de la mostra.
- El sistema cal que pugui emmagatzemar un mínim de 9 mostres per a l'anàlisi automàtic tant en mode reflexió com en transmissió.
- El sistema de portamostres cal que inclogui un joc de portamostres per treballar en mode reflexió i transmissió.
- Les cambres de temperatura cal que tinguin motoritzada l'alçada de la mostra per compensar-ne la dilatació.
- Sistema per poder fer difracció combinada amb temperatura variable i rampes des de temperatura de -150°C fins a +1600°C.

1.2.7. Detector de raigs-X

- El detector de raigs-X cal que sigui sensible a la posició lineal amb tires de Si.
- El detector cal que tingui com a mínim 160 canals o tires de Si.
- El detector cal que pugui treballar amb radiació de Cu, Co, Cr, Ag i Mo.
- L'eficàcia mínima per les radiacions de Cu, Co i Cr del 99%.
- El detector cal que sigui capaç de discriminar la radiació de fluorescència produïda per la mostra sense necessitat de monocromador secundari.
- El detector cal que estigui lliure de manteniment i que no requereixi manteniment ni refredament per aigua o gas de purga.



Codi de verificació: 7d9109ba1e6e71cf

Per a la verificació del següent codi podrà connectar-se a la següent adreça:
<http://contractaciopre.urv.cat/licitacion/verificadorCopiaAutentica.do?codigoVerificacion=7d9109ba1e6e71cf>

- El proveïdor cal que certifiqui que tots els canals del detector funcionen correctament i no n'hi ha de defectuosos.
- El detector cal que pugui començar a treballar a partir de $0.2^\circ 2\theta$ amb tots els accessoris que calguin per obtenir la millor relació pic/fons.

2. LOT 2 DETECTOR D'ÀREA

2.1. Objecte del contracte:

L'objecte del present lot és el subministrament d'un detector de raigs-X d'àrea acobable a un difractòmetre de la marca BRUKER D8 ADVANCE, en substitució de l'actual detector HI-STAR.

2.2. Característiques tècniques de l'equip

El detector ha de treballar amb rraciació de Cu i ha de ser compatible amb el difractòmetre de la marca BRUKER i model D8-ADVANCE. Per això, s'inclouran en el contracte tots aquells elements que es necessitin per fer efectiva la comptabilitat entre el detector i el difractòmetre, tant a nivell de software com a nivell de hardware.

El detector ha d'incloure tots els elements per poder-lo calibrar i ajustar.

El detector ha de ser lliure de manteniment.

Les especificacions tècniques mínimes son:

- Àrea sensible ≥ 13.5 cm.
- Resolució espacial igual o millor a 68×68 μm .
- Soroll de fons inferior a 0.0005 cps/mm²
- Resolució energètica igual o millor a 8.0 keV
- Intensitat màxima sense saturació igual o millor a 1.5×10^6 cps.
- Temperatura de treball de $15-30^\circ\text{C}$
- Rang dinàmic igual o millor a $1 \times 10^9 \sqrt{t}$ (t temps d'adquisició)
- Software associat de mesura i anàlisi.
- La instal·lació d'aquest detector ha de mantenir la classificació del difractòmetre com a EXEMPT, segons la legislació espanyola vigent.
- Tots els accessoris necessaris per instal·lar aquest detector en el difractòmetre BRUKER D8.
- El detector subministrat inclou un PC per soportar la comunicació amb aquest detector i el difractòmetre BRUKER D8.

3. LOT 3 PROGRAMES PER A LA INTERPRETACIÓ I TRACTAMENT DE DADES

3.1. Objecte del contracte:



Codi de verificació: 7d9109ba1e6e71cf

Per a la verificació del següent codi podrà connectar-se a la següent adreça
<http://contractaciopre.urv.cat/licitacion/verificadorCopiaAutentica.do?codigoVerificacion=7d9109ba1e6e71cf>

L'objecte del present lot és el subministrament dels programes necessaris per a la interpretació de les dades de difracció recollides amb els difractòmetres i tractar-les amb diferents mètodes per extreure'n el màxim d'informació possible.

Les característiques tècniques mínimes del/s programa/es d'interpretació i interpretació de dades han de ser:

- Importació directe de tots els difractogrames generats amb els difractòmetres actuals SIEMENS D5000 i BRUKER D8 i el detector d'àrea del LOT 2.
- Compatible amb la base de dades PDF-2 2018.
- Visualització de difractogrames en 2D (detectors d'àrea) i 3D (2θ , Intensitat i 3a dimensió)
- Integració i combinació (*merge*) de difractogrames en 2D (detectors d'àrea)
- Combinació (*merging*) de difractogrames
- Importació directa de difractogrames en format text (xy) amb qualsevol longitud d'ona.
- Creació de fitxes d'usuari i incorporació als criteris de búsqueda
- Ajust dels paràmetres de cel·la de les fitxes PDF-2
- Generador de pics en base a uns paràmetres de cel·la donats
- Visualització de fitxes PDF-2 amb varies longituds d'ona
- Combinació del percentatge elemental durant la búsqueda i quantificació
- Ajust de difractogrames mètode Le Bail, Pawley i Rietveld.
- Anàlisi microestructural (mida de cristall i microdeformació).
- Addició de restriccions y constriccions durant l'ajust de paràmetres.
- Ajust d'amplades anisotròpiques.
- Modelització de defectes d'empilament (*stacking faults*)
- Incorporació de Fundamental Parameters Approach
- Incorporació de Whole Powder Pattern Modelling
- Indexació de difractogrames
- Edició de cossos rígids
- Resolució d'estructures amb dades de pols i de monocristall amb els mètodes Monte Carlo, Simulated Annealing i Charge Flipping.
- Anàlisi de diferències de Fourier
- Refinament d'estructures magnètiques
- Correcció d'orientació preferencial amb els mètodes March-Dollase i Spherical Harmonics.
- Ajust simultani de varis difractogrames dependents o independents entre ells (ajust paramètric).



Codi de verificació: 7d9109ba1e6e71cf

Per a la verificació del següent codi podrà connectar-se a la següent adreça:
<http://contractaciopre.urv.cat/licitacion/verificadorCopiaAutentica.do?codigoVerificacion=7d9109ba1e6e71cf>

- Correcció de Brindley
- Importació directa d'estructures en format CIF
- Automatització d'ajustos
- Incorporació de funcions matemàtiques definides per l'usuari durant l'ajust

4. MANUALS I INFORMACIÓ COMPLEMENTÀRIA

Documentació que acrediti el compliment dels requisits de les característiques tècniques establerts en aquest Plec de Prescripcions Tècniques. Les característiques tècniques de l'equipament i els seus accessoris s'acreditaran mitjançant informes, catàlegs, notes tècniques específiques de la configuració descrita, manuals d'usuari, o equivalents.

Entre la documentació tècnica, s'hauran d'incloure les necessitats de serveis auxiliars per a la instal·lació de cada equip: aigua, potència elèctrica, gasos o altres.

5. FORMACIÓ:

L'adjudicatari proporcionarà formació al personal responsable de l'equip de l'SRCiT en temps i intensitat necessària per a poder conèixer les possibilitats i funcionament del nou equipament, així com per assegurar la plena autonomia en la manipulació, tractament de dades i manteniment de l'equip objecte de la present licitació. El programa de formació del personal es durà a terme abans que l'equip comenci a donar servei efectiu i s'entendrà inclòs en el preu ofertat. Els cursos han de ser impartits per especialistes amb experiència acreditada.

Aquesta formació constarà de dues etapes: La primera d'una durada suficient i no inferior a 2 dies en el propi lloc d'instal·lació i per assolir l'especialització desitjada. Una segona etapa es realitzarà un cop l'usuari s'hagi familiaritzat amb l'instrument i s'hauria de materialitzar dins d'un període no superior als 3 mesos després de la primera etapa i es durà a terme en el propi lloc d'instal·lació o a les instal·lacions de l'empresa adjudicatària.

6. NORMATIVA AMBIENTAL

El desembalatge i recollida de residus generats durant el desembalatge i instal·lació de l'equip correrà a càrrec de l'adjudicatari.

L'adjudicatari retirarà els residus del centre i farà un tractament d'acord amb la legislació vigent.

És condició indispensable que les empreses licitadores exposin per escrit la seva política de sostenibilitat ambiental com a fabricants (indústria neta). A tal efecte, adjuntaran en annex (juntament amb els certificats acreditatius del Sistema de Gestió de Qualitat ISO 9001:2015), tots els certificats oficials d'empresa que demostrin la idoneïtat de la mateixa des del punt de vista de Sostenibilitat Ambiental, concretament, la certificació UNE-EN ISO 14001/20015.

7. GARANTIA:



Codi de verificació: 7d9109ba1e6e71cf

Per a la verificació del següent codi podrà connectar-se a la següent adreça:
<http://contractaciopre.urv.cat/licitacion/verificadorCopiaAutentica.do?codigoVerificacion=7d9109ba1e6e71cf>



Tot el material subministrat, incloent els programes informàtics, tindran com a mínim dos anys de manteniment total gratuït, susceptible de ser millorat pel licitador en la seva oferta.

El manteniment total cobrirà:

Manteniment preventiu: Inclourà al menys una revisió anual en la qual es substitueixin totes les peces sotmeses a desgast. El cost de les peces, transport, desplaçament i ma d'obra hauran d'estar inclosos.

Manteniment correctiu: Inclourà totes les intervencions que siguin precises tant d'assistència física com telemàtica, així com els components o peces que fos necessari canviar, transport, desplaçament i ma d'obra de quants tècnics i altres professionals haguessin d'intervenir durant el citat període.

8. PERÍODE DE LLIURAMENT:

Dos mesos, a partir del dia següent a la formalització del contracte (a tal efecte es considerarà que la data de formalització és la data en la qual l'òrgan de contractació de la URV signi digitalment el contracte).

9. LLIURAMENT I INSTAL·LACIÓ:

Els equips hauran d'anar convenientment embalats per tal que arribin en les millors condicions. Qualsevol desperfecte dels equips ocasionats en el transport fins al punt d'utilització correrà a càrrec de l'empresa proveïdora.

L'equip es subministrarà complet, incloent tots els elements necessaris per a la correcta instal·lació, posada a punt i funcionament. Durant la verificació del funcionament de l'equip, prèviament a l'acta de recepció de l'equip, es requerirà que l'adjudicatari demostrï i acrediti in situ que l'equip compleix amb el què s'ha establert a l'apartat 2 del present Plec Tècnic (Característiques tècniques de l'equip), així com les millores ofertades.

Lloc d'instal·lació:

Servei de Recursos Científics i Tècnics
Av. Països Catalans, 26 - Campus Sescelades, Edifici N2
43007 – Tarragona

Tel.: 977 55 97 53 Fax: 977 55 8261

Francesc.gispert@urv.cat

Dr Francesc Gispert i Guirado

Responsable del contracte

Tècnic de la Unitat de Caracterització de Materials del Servei de Recursos Científics i Tècnics.



Codi de verificació: 7d9109ba1e6e71cf

Per a la verificació del següent codi podrà connectar-se a la següent adreça
<http://contractaciopre.urv.cat/licitacion/verificadorCopiaAutentica.do?codigoVerificacion=7d9109ba1e6e71cf>