

PLIEGO DE PRESCRIPCIONES TÉCNICAS QUE RIGE EL SUMINISTRO DE UN DIFRACTÓMETRO DE RAYOS-X DE POLVO, DETECTOR DE ÁREA Y PROGRAMAS PARA LA INTERPRETACIÓN Y TRATAMIENTO DE DATOS PARA EL SERVEI DE RECURSOS CIENTÍFICS y TÈCNICS DE LA UNIVERSITAT ROVIRA y VIRGILI (URV), MEDIANTE LOTES

LOTE 1: DIFRACTÓMETRO DE RAYOS-X DE POLVO

LOTE 2: DETECTOR DE ÁREA

LOTE 3: PROGRAMAS PARA LA INTERPRETACIÓN Y TRATAMIENTO DE DATOS

1. LOTE 1 DIFRACTÓMETRO DE RAYOS-X DE POLVO

1.1. Objeto del contrato:

El objeto del presente lote es el suministro de un equipo de difracción de rayos-X de polvo que permita la adquisición de datos en modo reflexión y transmisión.

1.2. Características técnicas del equipo

Las características técnicas del equipo ofertado deberán de ser debidamente documentadas por parte del licitador.

Es necesario que el licitador aporte imágenes de la configuración completa del equipo descrito, así como de aquellas secciones y/o accesorios que considere conveniente.

Todas las especificaciones técnicas relacionadas son de mínimos y por tanto, de obligado cumplimiento.

Los requisitos mínimos que tiene que cumplir el equipo son los siguientes:

1.2.1. General

- El difractómetro se ofrecerá como un sistema completamente funcional, completo e instalado.
- El difractómetro deberá de ser operable mediante la red o internet.
- El difractómetro deberá de permitir el diagnóstico remoto basado en la red o internet.
- El difractómetro debe admitir geometrías de Bragg-Brentano y de haz paralelo con los accesorios opcionales adecuados.
- El sistema tiene que ser totalmente compatible con las directrices CE:
 - Directiva de maquinaria (2006/42 CE)
 - Equipamiento eléctrico (2006/95/CE)
 - Compatibilidad electromagnética (2004/108/CE)

- El sistema tiene que mostrar un marcado CE actualizado, una declaración de conformidad CE actualizada y toda la documentación requerida.
- El difractor deberá de tener la aprobación, según la legislación española, como equipo de radiaciones ionizantes EXENTO de ser declarado instalación radioactiva.
- El difractor estará conectado a un PC completo con Windows-10 o superior con suficiente capacidad de almacenamiento y memoria RAM (RAM >16Gb, SSD >500Gb) para correr los programas de medida y gestión del equipo, así como los programas de evaluación de datos y tratamiento.

1.2.2. Cabina de rayos-X

- Los orificios para la introducción de cables y tuberías deben de estar homologados de acuerdo con la normativa española sobre radiaciones ionizantes sin romper la estanqueidad de la cabina.
- La cabina debe alojar en su interior la electrónica de control tanto del difractor como de las cámaras de temperatura.

1.2.3. Tubo de rayos-X y generador

- La corriente del generador de rayos-X debe tener como valores mínimo y máximo de 5 y 60 mA seleccionables en pasos de 1mA, con una estabilidad mejor que $\pm 0.005\%$ para $\pm 10\%$ de fluctuaciones de la red.
- El voltaje del generador de rayos-X debe tener como valores mínimo y máximo de 20 y 60 kV seleccionables en pasos de 1kV, con una estabilidad mejor que $\pm 0.005\%$ para $\pm 10\%$ de fluctuaciones de la red.
- La configuración de los kV y mA tiene que poder ajustarse mediante software.
- Tubo de rayos-X de tipo cerámico de radiación de Cu de foco fino y de 2.2 Kw de potencia.

1.2.4. Goniómetro

- El goniómetro será vertical con configuración theta-theta (θ - θ).
- El goniómetro es necesario que tenga un mecanismo de accionamiento libre de mantenimiento.
- El goniómetro es necesario que tenga un intervalo angular de 360° (sin accesorios).
- El goniómetro es necesario que tenga un intervalo de medida de $-110 \leq 2\theta \leq 168^\circ$, en función de los accesorios.
- El tamaño del paso mínimo tiene que ser de como mínimo 0.0001° .

1.2.5. Óptica primaria y secundaria

- El sistema debe incorporar la óptica necesaria para realizar medidas en reflexión y transmisión con geometría de Bragg-Brentano y geometría de haz paralelo.
- El sistema es necesario que incorpore los elementos necesarios (slits, knives, ...), para analizar capilares en modo transmisión y reducir la difusión del aire a ángulos bajos.
- La óptica primaria es necesario que tenga un espejo para óptica paralela, ventanas fijas y variables intercambiables.
- La óptica secundaria es necesario que tenga un colimador de haz paralelo, ventanas fijas y variables intercambiables.
- El sistema es necesario que tenga un reconocimiento de todos los componentes de la óptica primaria en tiempo real y totalmente automático.

1.2.6. Plataforma de portamuestras

- Es necesario que tenga un soporte de muestras en capilar, con motor paso a paso y totalmente controlado para software. Este soporte Es necesario que sea compatible con el cabezal goniométrico de HUBER 1006, ya existente en el laboratorio.
- El sistema cargador de muestras tiene que ser controlable totalmente para software, con velocidad de rotación de la muestra.
- El sistema es necesario que pueda almacenar un mínimo de 9 muestras para el análisis automático tanto en modo reflexión como en transmisión.
- El sistema de portamuestras es necesario que incluya un juego de portamuestras para trabajar en modo reflexión y transmisión.
- Les cámaras de temperatura Es necesario que tengan motorizada la altura de la muestra para compensar la dilatación.
- Sistema para poder hacer difracción combinada con temperatura variable y rampas desde temperatura de -150°C hasta a $+1600^{\circ}\text{C}$.

1.2.7. Detector de rayos-X

- El detector de rayos-X es necesario que sea sensible a la posición lineal con tirs de Si.
- El detector Es necesario que tenga como a mínimo 160 canales o tiras de Si.
- El detector Es necesario que pueda trabajar con radiación de Cu, Co, Cr, Ag y Mo.
- La eficacia mínima para las radiaciones de Cu, Co y Cr del 99%.
- El detector Es necesario que sea capaz de discriminar la radiación de fluorescencia producida para la muestra sin necesidad de monocromador secundario.
- El detector Es necesario que sea libre de mantenimiento y que no requiera mantenimiento ni enfriamiento por agua o gas de purga.

- El proveedor es necesario que certifique que todos los canales del detector funcionen correctamente y no tiene defectuosos.
- El detector es necesario que pueda comenzar a trabajar a partir de $0.2^\circ 2\theta$ con todos los accesorios que sean necesarios para obtener la mejor relación pico/fondo.

1. LOTE 2 DETECTOR DE ÁREA

1.1. Objeto del contrato:

El objeto del presente lote es el suministro de un detector de rayos-X de área acoplable a un difractorómetro de la marca BRUKER D8 ADVANCE, en substitución del actual detector HI-STAR.

1.2. Características técnicas del equipo

El detector tiene que trabajar con radiación de Cu y tiene que ser compatible con el difractorómetro de la marca BRUKER y modelo D8-ADVANCE. Por este motivo, se incluirán en el contrato todos aquellos elementos que se necesiten para hacer efectiva la compatibilidad entre el detector y el difractorómetro, tanto a nivel de software como a nivel de hardware.

El detector ha de incluir todos los elementos para poder-lo calibrar y ajustar.

El detector tiene que ser libre de mantenimiento.

Las especificaciones técnicas mínimas son:

- Área sensible ≥ 13.5 cm.
- Resolución espacial igual o mejor a 68×68 μm .
- Ruido de fondo inferior a 0.0005 cps/mm²
- Resolución energética igual o mejor a 8.0 keV
- Intensidad máxima sin saturación igual o mejor a 1.5×10^6 cps.
- Temperatura de trabajo de $15-30^\circ\text{C}$
- Rango dinámico igual o mejor a $1 \times 10^9 \sqrt{t}$ (t tiempo de adquisición)
- Software asociado de medida y análisis.
- La instalación de este detector tiene que mantener la clasificación del difractorómetro como a EXENTO, según la legislación española vigente.
- Todos los accesorios necesarios para instalar este detector en el difractorómetro BRUKER D8.
- El detector suministrado incluye un PC para soportar la comunicación con este detector y el difractorómetro BRUKER D8.

2. LOTE 3 PROGRAMAS PARA LA INTERPRETACIÓN y TRATAMIENTO DE DATOS

2.1. Objeto del contrato:

El objeto del presente lote es el suministro de los programas necesarios para la interpretación de los datos de difracción recogido con los difractómetros y tratarlos con diferentes métodos para extraer el máximo de información posible.

Las características técnicas mínimas de los programas/es de interpretación y tratamiento de datos han de ser:

- Importación directa de todos los difractogramas generados con los difractómetros actuales SIEMENS D5000 y BRUKER D8 y el detector de área del LOTE 2.
- Compatible con la base de datos PDF-2 2018.
- Visualización de difractogramas en 2D (detectores de área) y 3D (2θ , Intensidad y 3a dimensión)
- Integración y combinación (*merge*) de difractogramas en 2D (detectores de área)
- Combinación (*merging*) de difractogramas
- Importación directa de difractogramas en formato texto (xy) con cualquier longitud de onda.
- Creación de fichas de usuario y incorporación a los criterios de búsqueda
- Ajuste de los parámetros de celda de las fichas PDF-2
- Generador de picos en base a unos parámetros de celda dados.
- Visualización de fichas PDF-2 con varias longitudes de onda
- Combinación del porcentaje elemental durante la búsqueda y cuantificación
- Ajuste de difractogramas método Le Bail, Pavley y Rietveld.
- Análisis microestructural (tamaño de cristalito y microdeformación).
- Adición de restricciones y constricciones durante el ajuste de parámetros.
- Ajuste de anchuras anisotrópicas.
- Modelización de defectos de apilamiento (*stacking faults*)
- Incorporación de Fundamental Parameters Approach
- Incorporación de Whole Powder Pattern Modelling
- Indexación de difractogramas
- Edición de cuerpos rígidos
- Resolución de estructuras con datos de polvo y de monocristal con los métodos Monte Carlo, Simulated Annealing y Charge Flipping.
- Análisis de diferencias de Fourier
- Refinamiento de estructuras magnéticas
- Corrección de orientación preferencial con los métodos March-Dollase y Spherical Harmonics.

- Ajuste simultaneo de varios difractogramas dependientes o independientes entre ellos (ajust paramétrico).
- Corrección de Brindley
- Importación directa de estructuras en formato CIF
- Automatización de ajustes
- Incorporación de funciones matemáticas definidas por el usuario durante el ajuste

3. MANUALES E INFORMACIÓN COMPLEMENTARIA

Documentación que acredite el cumplimiento de los requisitos de las características técnicas establecidas en este Pliego de Prescripciones Técnicas. Las características técnicas del equipo y de sus accesorios se acreditarán mediante informes, catálogos, notas técnicas específicas de la configuración descrita, manuales de usuario, o equivalentes.

Entre la documentación técnica, se deberán incluir las necesidades de servicios auxiliares para la instalación de cada equipo: agua, potencia eléctrica, gases o otros.

4. FORMACIÓN:

El adjudicatario proporcionará formación al personal responsable del equipo del SRCiT en tiempo e intensidad necesario para poder conocer las posibilidades y funcionamiento del nuevo equipo, así como para asegurar la plena autonomía en la manipulación, tratamiento de datos y mantenimiento del equipo objeto de la presente licitación. El programa de formación del personal se llevará a término antes que el equipo empiece a dar servicio efectivo y se entenderá incluido en el precio ofertado. Los cursos han de ser impartidos por especialistas con experiencia acreditada.

Esta formación deberá impartirse en el lugar de la instalación y constará de dos visitas: La primera de una duración suficiente y no inferior a 2 días para conseguir la especialización deseada. Una segunda visita se realizará una vez el usuario se haya familiarizado con el instrumento y se debería materializar dentro de un período no superior a los 3 meses después de la primera visita.

5. NORMATIVA AMBIENTAL

Los equipos deberán de ir convenientemente embalados para que lleguen en las mejores condiciones. Cualquier desperfecto de los equipos ocasionados en el transporte hasta al punto de utilización correrá a cargo de le empresa proveedora.

El desembalaje y recogida de los residuos generados durante el desembalaje e instalación del equipo correrá a cargo del adjudicatario.

El adjudicatario retirará los residuos del centro y hará un tratamiento de acuerdo con la legislación vigente.

Es condición indispensable que las empresas licitadoras expongan por escrito su política de sostenibilidad ambiental como fabricantes (industria limpia). Para tal efecto, adjuntaran como anexo (juntamente con los certificados acreditativos del Sistema de Gestión de Calidad ISO 9001:2015), todos los certificados oficiales de la empresa que demuestren la idoneidad de esta desde el punto de vista de Sostenibilidad Ambiental, concretamente, la certificación UNE-EN ISO 14001/20015.

6. GARANTIA:

Todo el material suministrado, incluyendo los programas informáticos, tendrán como mínimo dos años de mantenimiento total gratuito, susceptible de ser mejorado por el licitador en su oferta.

El mantenimiento total cubrirá:

Mantenimiento preventivo: Incluirá al menos una revisión anual en la cual se sustituyan todas las piezas sometidas a desgaste. El coste de las piezas, transporte, desplazamiento y mano de obra deberán de estar incluidos.

Mantenimiento correctivo: Incluirá todas las intervenciones que sean precisas tanto de asistencia física como telemática, así como los componentes o peces que fuese necesario cambiar, transporte, desplazamiento y mano de obra de cuantos técnicos y otros profesionales tuviesen que intervenir durante el citado período.

7. PERÍODO DE ENTREGA:

Dos meses, a partir del día siguiente a la formalización del contracte (a tal efecto se considerará que la fecha de formalización es la fecha en la cual el órgano de contratación de la URV firme digitalmente el contrato).

8. ENTREGA E INSTALACIÓN:

Los equipos deberán de ir convenientemente embalados para que lleguen en las mejores condiciones. Cualquier desperfecto de los equipos ocasionados en el transporte hasta el punto de utilización correrá a cargo de la empresa proveedora.

El desembalaje y recogida de residuos generados durante el desembalaje e instalación del equipo correrá a cargo del adjudicatario.

El equipo es suministrará completo, incluyendo todos los elementos necesarios para la correcta instalación, puesta a punto y funcionamiento. Durante la verificación del funcionamiento del equipo, previamente al acta de recepción del equipo, se requerirá que el adjudicatario demuestre y acredite in situ que el equipo cumple con lo que se ha establecido en el apartado 2 del presente Pliego Técnico (Características técnicas del equipo), así como las mejoras ofertadas.

Lugar de instalación:

Servei de Recursos Científics y 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 y Guirado

Responsable del contrato

Tècnico de la Unidad de Caracterización de Materiales del Servei de Recursos Científics y Tècnics.