



PLEC DE PRESCRIPCIONS TÈCNIQUES PER A LA CONTRACTACIÓ DE LA RENOVACIÓ DEL DIFRACTÒMETRE DE RAIGS X PANALYTICAL ALPHA1 DE LA UNITAT DE DIFRACCIÓ DE RAIGS X I ANÀLISI TÈRMICA DELS CENTRES CIENTÍFICS I TECNOLÒGICS DE LA UNIVERSITAT DE BARCELONA.

EXPEDIENT 2024/113

1. OBJECTE

El present plec de prescripcions tècniques (des d'ara PPT) té per objecte definir les característiques i requisits mínims que hauran de reunir els béns que s'ofereixin en el present concurs, per la renovació del difractòmetre de Raigs X alpha 1 de la Unitat Difracció de Raigs X i Anàlisi Tèrmica (DRX i AT) dels Centres Científics i Tecnològics de la Universitat de Barcelona (CCiTUB)

L'objectiu de la renovació és mantenir i millorar les possibilitats de mesura del difractòmetre de raigs X alpha1 ja que, tractant-se d'un element que està sotmès a desgast, actualment ja està en unes condicions en què es fa necessària la seva substitució.

En el present plec de prescripcions tècniques es descriuran aquells punts que es considerin de major rellevància i no es farà constar una descripció detallada dels components. No obstant això, un cop completada la renovació amb la instal·lació del nou equip, ha de funcionar a plena satisfacció, complint totes i cadascuna de les especificacions del fabricant del difractòmetre.

Abans de l'adjudicació definitiva, la unitat promotora de la licitació pot sol·licitar al subministrador la informació i documentació complementària, especialment d'allò que faci referència als aspectes de configuració i/o característiques tècniques de l'equip ofert.

2. CONSIDERACIONS GENERALS

L'equip difractòmetre de Raigs X, *PANalytical X'Pert PRO MPD alpha1*, en endavant *MPD alpha1* està operatiu a la Unitat de Difracció de Raigs X (DRX) des de 2004 (al laboratori en la sala 29 posterior a la planta baixa de l'edifici "històric", C/Lluís Solé i Sabarís 1 08028 Barcelona, dels Centres Científics i Tecnològics de la Universitat de Barcelona, CCiT-UB).

Es tracta d'un difractòmetre de Raigs X de geometria Bragg-Brentano en reflexió, amb goniòmetre $\theta/2\theta$ de 240 mm de radi, amb la característica distintiva i diferencial de poder treballar amb radiació estrictament monocromàtica $\text{Cu K}\alpha_1$ ($\lambda=1.5406 \text{ \AA}$) a través de l'ús del monocromador primari corbat focalitzant tipus Johansson de Ge (111)

Des de 2004 i fins desembre de 2023 l'equip ha treballat pràcticament ininterrompuda, exceptuant períodes de vacances i interrupcions per avaries, i en el 95 % del temps amb el monocromador primari i per tant amb radiació estrictament monocromàtica $\text{Cu K}\alpha_1$. Aquesta configuració ha esdevingut un estàndard per les mesures, obtenció de difractogrames, de materials policristal·lins i parcialment cristal·lins en geometria de reflexió, tant per mostres sòlides en pols de tot tipus com per mostres sòlides en *bulk*, com per exemple metalls, materials ceràmics, polímers ..., i també per materials en capa prima, obtenint pics únics per cada pic/reflexió de Bragg i amb molt bona puresa espectral que genera excel·lents relacions pic/fons.

L'equip *MPD alpha1* es pot considerar com un equip d'ús fàcil, directe i molt operatiu per mesures DRX estàndard de materials policristal·lins i parcialment cristal·lins de tot tipus, sovint primeres mesures, resultant difractogrames d'alta resolució, pics únics i d'excel·lent resolució per baixa contribució instrumental (LaB6 SRM-660a, patró NIST de calibratge instrumental, $\text{FWHM}=0.04 / 0.05^\circ 2\theta$ a $30^\circ 2\theta$) i amb excel·lent relació pic/fons.

Addicionalment l'equip ha permès la obtenció de difractogrames, en aquestes tot tipus de mostres policristal·lins i parcialment cristal·lins, amb millor estadística de comptatge, perfectament vàlids



per avaluacions per ajust global de perfil (Rietveld i/o Pattern-matching, mètodes de Pawley o Le Bail per exemple, i/o amb ajustos de pics individualment) per caracteritzacions estructurals i microestructurals i per anàlisi quantitativa de fases

Des del passat mes de desembre de 2023, l'equip *MPD alpha1* ja no pot operar amb radiació monocromàtica $\text{Cu K}\alpha_1$. Un problema irreversible en el sistema de *tuning* / alineació ha fet del tot inoperatiu el monocromador primari. Malvern Panalytical no pot oferir un nou monocromador ni cap monocromador substitutiu en equips de tecnologia *X'Pert PRO MPD*. L'equip *MPD alpha1* pot operar amb radiació convencional de $\text{Cu K}\alpha_{1+2}$ ($\lambda_{\text{mitjana}}=1.5418\text{\AA}$). A més l'equip, també des de desembre de 2023, té igualment irreversiblement avariats el mòdul de *slits* de divergència variable i pot operar solament amb divergència fixa. Divergència fixa i $\text{Cu K}\alpha_{1+2}$ la podem oferir en altre(s) equips del Laboratori, i la poden oferir altres laboratoris del nostre entorn proper

La renovació / substitució de l'equip *MPD alpha1* per un de nova generació igualment de *Malvern Panalytical*, el *Empyrean Alpha-1*, equipat amb monocromador primari focalitzant corbat tipus Johansson igualment de nova generació, en el termes de l'oferta adjunta, permetrà recuperar la prestació distintiva i diferencial d'obtenció de difractograms en geometria Bragg Brentano i reflexió amb radiació estrictament monocromàtica $\text{Cu K}\alpha_1$, millorant prestacions, encara amb millor resolució i puresa espectral. L'equip podrà tornar a oferir mesures, obtenció de difractograms, estàndard amb alta resolució amb pics/reflexions de Bragg únics i amb excel·lent relació pic/fons per la gran puresa espectral, per tot tipus de mostres policristal·lines i parcialment cristal·lines. Igualment es podrà seguir oferint la obtenció de difractograms per ajust global de perfil, per caracteritzacions estructurals i microestructurals i per anàlisi qualitativa de fases, d'immillorable resolució per pràcticament tot tipus de mostres policristal·lines i parcialment cristal·lines incloent mostres en capa prima

La renovació / substitució permetrà a més aprofitar components del equip a substituir *MPD alpha1*, principalment components electrònics i mecànics, com a peces de recanvi d'altres dos equips PANalytical MPD i un PANalytical MRD disponibles a la Unitat de DRX dels CCiT-UB

3. CARACTERÍSTIQUES TÈCNIQUES DEL COMPONENT

Els licitadors hauran de presentar una proposta que compleixi tots els requisits que es descriuen a continuació:

- Generador de 4kW i 60 kV i tub de raigs de Cu d'alta resolució.
- Goniòmetre omega-2theta.
- Monocromador primari focalitzant tipus Johansson de Ge (111) corbat tallat asimètricament.
- Feix incident, portamostres i feix difractat compatibles totalment amb el maquinari i programari existents.

4. INSTAL·LACIÓ

L'adjudicatari es compromet a realitzar la instal·lació i ajustos necessaris del nou difractòmetre, renovació del difractòmetre alpha1 de la Unitat de Difracció de Raigs X i Anàlisi Tèrmica dels CCiT-UB perquè compleixi les especificacions tècniques fixades.

Barcelona,

Juan Fran Sangüesa
Director
Centres Científics i Tecnològics