



PLEC DE PRESCRIPCIONS TÈCNIQUES PER A LA CONTRACTACIÓ DE LA RENOVACIÓ DEL CALORÍMETRE DIFERENCIAL D'ESCOMBRAT DSC822e DE METTLER TOLEDO DE LA UNITAT DE DIFRACCIÓ DE RAIGS X I ANÀLISI TÈRMICA DELS CENTRES CIENTÍFICS I TECNOLÒGICS DE LA UNIVERSITAT DE BARCELONA.

EXPEDIENT 2024/166

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 calorímetre diferencial d'escombrat DSC822e de Mettler-Toledo 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 prestacions de servei i possibilitats de mesura del calorímetre diferencial d'escombrat DSC822e ja que, tractant-se d'un equip obsolet i sense peces de recanvi, 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 calorímetre diferencial d'escombrat.

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 calorímetre diferencial d'escombrat, *DSC822e de Mettler-Toledo*, en endavant *DSC822e*, està operatiu a la Unitat DRX i AT des de 2001 (al laboratori d'Anàlisi Tèrmica ubicat al Parc Científic de Barcelona (PBC12), C/Baldiri Reixac, 10-12, 08028 Barcelona), dels Centres Científics i Tecnològics de la Universitat de Barcelona, CCiT-UB).

Es tracta d'un calorímetre diferencial d'escombrat que treballa amb el principi de mesura de flux de calor reconegut per l'ICTAC (International Confederation for Thermal Analysis and Calorimetry).

Des de 2001 i fins a dia d'avui l'equip treballa pràcticament ininterrompuda, exceptuant períodes de vacances i interrupcions per avaries, i sempre en un rang de temperatures de 30 °C fins a 600 °C a una velocitat estàndard de 10 °C/min, però amb la possibilitat de treballar a diferents velocitats d'escalfament/refredament en funció de les necessitats de l'estudi, i també amb la possibilitat de realitzar els anàlisis sota diferents atmosferes de treball (nitrogen, aire, oxigen, heli o argó). Aquesta versatilitat ha esdevingut un estàndard per les mesures, obtenció de termogrames, principalment de principis actius així com nous materials de recerca (nanopartícules, MOFs, COFs, compostos orgànics i inorgànics). És una tècnica essencial per a la recerca i caracterització de noves formes cristal·lines (per exemple de principis actius farmacèutics i nutraceutics) i d'altres noves formes sòlides com els cocristalls i per la caracterització de materials amorfs així com per a l'estudi de la formació d'eutèctics.

L'equip *DSC822e* presenta un sensor amb un sistema de termopars dissenyat per Mettler-Toledo que permet obtenir termogrames amb una molt bona resolució dels fenòmens endotèrmics i exotèrmics així com una elevada sensibilitat a l'hora de detectar fenòmens tèrmics durant l'escalfament/ refredament. Degut a aquesta molt bona resolució i sensibilitat és un equip emprat per a l'estudi de compatibilitat de principis actius/excipient i estudis de seguretat a través de DSC utilitzant gresols que aguanten una elevada pressió.

L'equip *DSC822e* es pot considerar com un equip d'ús fàcil, directe i molt operatiu per determinacions de punts de fusió (*Onset*) així com la seva entalpia de fusió. Altres fenòmens tèrmic que es podem estudiar amb aquesta tècnica són la temperatura de transició vítria de materials/ principis actius amorfs, temperatura de descomposició, determinació de la capacitat calorífica, temperatures de transició endotèrmiques/exotèrmiques entre polimorfs, temperatura de cristal·lització i determinació del grau de puresa d'una mostra.

Des del 2018, l'altre calorímetre diferencial d'escombrat que disposava la Unitat i que era complementari a l'actual, el *DSC30* de Mettler-Toledo, es va espatllar de manera irreversible degut a que no es va poder reparar (equip obsolet sense peces de recanvi) i des de llavors no es poden fer prestacions de servei de comandes que volen treballar per sota de temperatura ambient. En aquest sentit, la determinació de la temperatura de transicions vítries de materials i principis actius amorfs que es trobem per sota de temperatura ambient no es poden determinar així com la recerca de noves formes cristal·lines a través de procediment anomenat "*quenching from the melt*" que permet obtenir un sòlid amorf partint d'un sòlid fos (líquid) i refredant-lo a una elevada velocitat per sota de temperatura ambient. Actualment l'equip *DSC822e* no disposa d'un sistema de refredament que permeti assolir baixes temperatures, només pot operar a partir de temperatura ambient.

La renovació / substitució de l'equip *DSC822e* per un de nova generació igualment de *Mettler-Toledo*, el *DSC5+*, dissenyat per obtenir corbes de DSC combinant els dos principis de mesura reconeguts per l'ICTAC: "DSC per Flux de Calor" i "DSC per Compensació de Potència" per a optimitzar la resolució de pics i l'estabilitat de línia de base, permetrà obtenir pics més estrets i definits, millorant les prestacions fet especialment important quan hi ha solapament de pics i en la caracterització de materials i principis actius. L'equip podrà ampliar la seva oferta de demanda ja que realitzarà mesures per sota de temperatura ambient gràcies a que té associat l'aparell *Cooling System TC100 MT CC 230V* que permetrà obtenir termogrames a baixa temperatura per a la caracterització i estudi de compostos amb transicions vítries per sota de temperatura ambient i ampliant el rang de mesura des de -80 °C a 600 °C. Igualment es podrà seguir oferint realització de termogrames a diferents velocitats d'escalfament/refredament variables des de 0,5 °C/min fins a 100 °C/min així com la realització de DSC modulats i DSC a pressió per a l'estudi de seguretat tèrmica de compostos.

La renovació / substitució permetrà a més aprofitar components auxiliars de l'equip a substituir *DSC822e*, principalment els gresols i premsa segelladora i el nou equip *DSC5+* es compatible amb la llicència de software *STARe* que ja disposa la Unitat de DRX i AT 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:

- Obtenir corbes de DSC combinant els dos principis de mesura reconeguts per l'ICTAC: "DSC per Flux de Calor" i "DSC per Compensació de Potència" per a optimitzar la resolució de pics i l'estabilitat de línia de base.
- Mesurar, en flux de calor, utilitzant un ajust electrònic en tot l'interval de temperatura sense la necessitat de patrons.
- Equip auxiliar que permetrà obtenir corbes de DSC per sota de temperatura ambient.



4. INSTAL·LACIÓ

L'adjudicatari es compromet a realitzar la instal·lació i ajustos necessaris del nou calorímetre diferencial d'escombrat, renovació del calorímetre diferencial d'escombrat DSC822e de la Unitat de Difracció de Raigs X i Anàlisi Tèrmica dels CCiT-UB perquè compleixi les especificacions tècniques fixades.

Barcelona, 17 d'octubre de 2024

Dr. Xavier Alcobé Ollé
Cap de la Unitat de Difracció de Raigs X i Anàlisi Tèrmica
Centres Científics i Tecnològics, Universitat de Barcelona