

PLEC DE PRESCRIPCIONS TÈCNIQUES DEL CONTRACTE DE SUBMINISTRAMENT, INSTAL·LACIÓ D'UN EQUIP DE DIFRACCIÓ DE RAIGS X PER A LA FUNDACIÓ INSTITUT DE RECERCA EN ENERGIA DE CATALUNYA

EXPEDIENT NÚM.: 25-0632

Índex

1. ANTECEDENTS I NECESSITATS	3
2. OBJECTE I ABAST DE LA LICITACIÓ	3
3. ESPECIFICACIONS TÈCNIQUES DE L'EQUIP A SUBMINISTRAR	3
4. EXECUCIÓ DEL CONTRACTE	8
5. FORMES DE SEGUIMENT I CONTROL DE L'EXECUCIÓ.....	9
6. DOCUMENTACIÓ TÈCNICA A APORTAR PER LES EMPRESES LICITADORES.....	9
7. MILLORES	

1. ANTECEDENTS I NECESSITATS

La Fundació Institut de Recerca en Energia de Catalunya, en endavant IREC, requereix d'un equip de Difracció de Raigs X (*XRD - X-Ray Diffraction*) d'alta resolució per a l'anàlisi de mostres de dipòsits de capes primes (*Thin Films*) i de pols policristal·lins per caracteritzar-ne amb alta resolució l'estructura nano i micro-cristal·lina.

Els grups de recerca de l'Àrea de Materials Avançats per a l'Energia de l'IREC, compostats pels següents grups: *Energy Storage, Harvesting and Catalysis, Functional Nanomaterials, Nanoionics and Fuel Cells* i *Solar Energy Materials and Systems*, basen una part important de les seves activitats de recerca en l'anàlisi de l'estructura nano i microcristal·lina dels nous materials desenvolupats en el marc dels projectes de recerca de l'IREC, per a optimitzar-los i així optimitzar els sistemes d'emmagatzematge i producció d'energia dels quals en formen part. Aquests projectes són claus per al desenvolupament de les ambicioses estratègies de descarbonització del sector energètic marcades pel nou Pacte Verd europeu.

2. OBJECTE I ABAST DE LA LICITACIÓ

El present Plec té per objecte establir les prescripcions tècniques particulars que regiran el contracte de subministrament, instal·lació i posada en marxa d'un equip difractòmetre de Raigs X d'alta resolució per a mesures de capes primes i de mostres en pols, així com la formació sobre el seu funcionament pel personal designat per l'IREC.

L'equip s'instal·larà a la seu de l'IREC ubicada a Sant Adrià del Besòs, situada al Carrer Jardins de les Dones de Negre, 1, 2a planta, 08930. L'equip haurà de complir amb totes les especificacions tècniques i funcionals que consten a l'apartat 3 del present Plec.

El subministrament inclou el trasllat del difractòmetre fins l'espai físic concret on s'instal·larà, que serà designat per l'IREC, a la direcció assenyalada anteriorment.

3. ESPECIFICACIONS TÈCNiques DE L'EQUIP A SUBMINISTRAR

La prestació regulada en aquest plec ha d'ajustar-se als requisits tècnics i funcionals que seguidament es detallen. Totes les especificacions descrites en aquest apartat tenen la consideració de requisits mínims obligatoris. Qualsevol oferta que no compleixi amb la totalitat d'aquests requisits serà exclosa del procediment de licitació.

3.1. Descripció tècnica de l'equip

L'equip objecte d'aquest plec és un difractòmetre de Raig X, per a mesures de mostres de *Thin Films*: GI (*Grazing Incidence*), XRR (*Reflectivity*), HR (*High Resolution*), RSM (*Reciprocal Space Maps*), *Pole Figures*, i anàlisi de *Residual Stress* i *Textures*; també permetrà fer mesures *in-situ* i *operando* (electroquímiques) i mesures de mostres en configuració Bragg-Brentano. L'equip ha de comptar amb els següents components i modes de mesura, amb les característiques tècniques mínimes indicades a continuació:

- Cabina de protecció anti-radiació
- Font de Raigs X: generador d'alta tensió i tub de raigs X
- Òptiques del feix primari, secundari, i colimadors
- Goniòmetre
- Plataformes porta-mostres
- Detector 2D
- Refrigerador extern
- Mesures de Thin Films: GI (*Grazing Incidence*), XRR (*Reflectivity*), HR (*High Resolution*), RSM (*Reciprocal Space Maps*) i *Pole figures*.
- Mesures *in-situ* i *operando*, amb capacitat d'integrar-hi mesures electroquímiques.
- Instal·lació de la '*non-ambient chamber*' propietat de l'IREC
- PC i Software de mesura i visualització de dades.
- Software de tractament de dades
- L'instrument ha de poder instal·lar-se a la seu de l'IREC a Sant Adrià del Besòs, complint amb les normatives de seguretat i homologació corresponent.

3.1.1. Cabina de protecció anti-radiació.

Ha de complir amb:

- *Aprobación de Tipo de Aparato Radiactivo per el Ministerio de Industria: Conforme al Reglamento sobre Instalaciones Nucleares y Radiactivas, aprobado por Real Decreto 1836/1999, de 3 de diciembre, y con el Reglamento sobre protección de la salud contra los riesgos derivados de la exposición a las radiaciones ionizantes.*
- *Ha de complir amb la normativa CE con certificado de conformidad CE actualizado a diciembre de 2009 que verifique el cumplimiento de la nueva Directiva Europea sobre Maquinaria 2006/42/EC de entrada en vigor efectiva a partir de diciembre de 2009.*

3.1.2 Font de Raigs X: Generador d'Alta Tensió i Tub de Raigs X.

- Generador de Raigs-X:
 - Potència ≥ 3 kW
 - Rang de Voltatge $\geq 20-50$ kV
 - Rang de Corrent $\geq 5-50$ mA
- Tub segellat ceràmic amb ànode de Coure:
 - 2 finestres de Focus: Focus lineal i focus puntual; el canvi entre els dos tipus de focus ha de ser senzill i ràpid.
 - Potència màxima del Tub ≥ 1.8 kW
- Estabilitat: $< 0.005\%$ per a alt voltatge i corrent per a una variació del 10% a l'entrada.

3.1.3 Òptiques del feix primari, secundari, i colimadors

L'instrument vindrà equipat com a mínim amb tots els elements òptics necessaris per a la mesura de *Thin Films (GI, XRR, HR, RSM, Pole figures)* i també per a la mesura de mostres diverses en configuració Bragg-Brentano:

- *Parallel beam 2-bounce Ge hybrid monochromator: per a HRXRD, RSM i Pole Figures. Per proporcionar un feix paral·lel amb alta resolució i alta intensitat i una narrow energy band $K\alpha_1$.*
- *Multilayer mirror: per proporcionar un feix incident altament paral·lel, així com supressió de white radiation, de $K\beta$ radiation, i de fluorescència.*
- *Divergence slits i anti-scatter slits programables.*
- *Sollers.*
- Sistema de control de l'*spot size* en la direcció ortogonal al feix per a *mapping (spot $\leq 1\text{mm}$)*
- Filtres i absorbents

3.1.4 Goniòmetre

Goniòmetre vertical de geometria *theta-theta* amb les següents característiques:

- Diàmetre del cercle de mesura $\geq 480\text{ mm}$
- Rang de $2\theta \geq -95^\circ$ a 162°
- Mínim increment $\leq 0.0001^\circ$
- Reproduïbilitat del posicionament $2\theta \leq \pm 0.0002^\circ$
- Velocitat angular màxima $\geq 8^\circ/\text{s}$
- Linealitat en tot el rang de $2\theta \leq \pm 0.01^\circ$

3.1.5. Plataformes Portamostres i sistemes *in-situ* i *operando*

- Plataforma ('*Euler Cradle*') o plataformes ('*Euler Cradle*' + '*XYZ*') portamostres per al moviment motoritzat en cinc eixos (Chi, Phi, X, Y, Z):
 - Recorregut en $X \geq 25\text{mm}$.
 - Recorregut en $Y \geq 50\text{mm}$.
 - Recorregut en $Z \geq 12\text{ mm}$.
 - Rang de Chi $\geq 96^\circ$ ($\geq -3^\circ$ a 93°)
 - Rang de Phi il·limitat.
 - Alçada màxima de mostra $\geq 16\text{ mm}$
 - Diàmetre màxim de mostra $\geq 70\text{ mm}$
 - Ha d'incorporar un sistema de fixació de mostres de Thin Films.

La Plataforma '*Euler Cradle*' ha de tenir moviment motoritzat en Z (Recorregut en $Z \geq 2\text{ mm}$).

- Cel·la electroquímica per a realitzar experiments *In-situ/operando*:
 - Amb carcassa *Air-tight* amb finestra transparent als raigs X.
 - Per a mesures en modes reflexió.
 - Plataforma o mòdul necessaris per a acoblar-la al difractòmetre.
- Suport o mòdul necessaris per a realitzar experiments en *Coin cells*, per a estudis *In-situ/operando* en geometria de reflexió.

- Software i hardware necessaris per a la comunicació amb un potenciostat Biologic SP-50 (propietat de l'IREC i actualment en ús) per a sincronitzar i automatitzar els experiments electroquímics i de difracció de Raigs-X en les *electrochemical cell* i *coin cell*.
- Instal·lació de la '*non-ambient chamber XRK900*' d'Anton Paar i el seu controlador 'TCU150' (ambdues propietat de l'IREC i actualment en ús), així com el hardware necessari per a la seva integració en el difractòmetre objecte del present contracte.
- Mostres de referència per a calibració.

3.1.7. Detector 2D

Detector 2D per a treballar amb radiació de Cu:

- Modes d'operació 0D, 1D i 2D sense necessitat de canviar l'orientació del detector.
- Àrea activa $\geq 196 \text{ mm}^2$.
- Nombre de píxels ≥ 65.000
- Grandària de pixel $\leq 100\mu\text{m} \times 100\mu\text{m}$
- Alt Rang Dinàmic (*high Dynamic Range*), que permeti realitzar mesures de XRR i HRXRD sense la necessitat d'utilitzar absorbents i sense risc de saturació.
- Capacitat de fer mesures de *Pole Figures* en mode 2D.
- Capacitat d'optimitzar entre Resolució i Camp de Visió (*Field of View*) mitjançant la variació de la distància entre detector i mostra.

3.1.8. Refrigerador extern

Refrigerador extern tipus aire-aire amb capacitat de refrigeració suficient per a l'equip ofertat.

3.1.9. Tipus de mesures

L'instrument estarà dedicat principalment a realitzar mesures de Thin Films: GI (*Grazing Incidence*), XRR (*Reflectivity*), HR (*High Resolution*), RSM (*Reciprocal Space Maps*) i *Pole figures*. També permetrà realitzar mesures de pols policristal·lins en configuració Bragg-Brentano.

3.1.10. PC i Software de control

PC de darrera generació, per executar i gestionar tot el software, tant de control com de tractament de dades, amb les següents característiques mínimes:

Processador Intel® Core™ i7 o superior
Sistema operatiu Windows 11 Pro
Memòria RAM $\geq 32 \text{ Gb}$
Disc dur SSD de $\geq 1\text{Tb}$

Software de control del difractòmetre, per a la programació i automatització dels experiments, i visualització de dades, per a tot el rang de mesures descrites, inclosa la predicció d'angles teòrics de RSM i Pole Figures a partir de l'estructura cristal·lina. Llicència i software actualitzats durant tota la vida útil de l'equip.

3.1.11. Software de tractament de dades

El software de tractament de dades haurà d'incloure com a mínim les següents funcionalitats:

- Visualització i anàlisi de dades 1D (*Theta-2Theta*, *Phi scans*, *Rocking Curves*) i 2D (*Pole Figures* i *RSM*), per determinar els paràmetres rellevants en Thin Films.
- Llicència i software actualitzats durant tota la vida útil de l'equip.

3.2. Manuais i informació complementària

L'adjudicatari entregará tots els manuals d'ús en format digital dels diferents components de l'equip i del software relacionat, mostrant les accions necessàries pel correcte funcionament i manteniment de l'equip.

3.3. Formació

Es proporcionarà un curs de formació pràctica i teòrica, presencial a la seu de l'IREC a Sant Adrià de Besòs, adreçat al personal tècnic i investigador designat per l'IREC (5 persones com a màxim). L'objectiu d'aquesta formació serà dotar dels coneixements i habilitats necessàries per poder emprar l'equip de forma segura i autònoma, obtenint-ne les màximes prestacions.

Haurà de complir els següents requisits mínims:

- Durada mínima de 3 jornades (24 hores).
- Cobrirà tots els aspectes de l'operació de l'equip, incloent-hi el funcionament del hardware, el software de control i adquisició de dades, i el software de tractament de dades per a totes les aplicacions descrites en aquest plec.
- Haurà de ser impartida per personal tècnic especialista del fabricant o distribuïdor autoritzat, amb experiència acreditada.
- S'impartirà en castellà o anglès.
- L'adjudicatari lliurará a l'IREC la documentació completa i els manuals d'ús en format digital i opcionalment també en format imprès.

4. INSTAL·LACIÓ, POSADA EN MARXA I FORMACIÓ

L'equip o sistema se subministrarà complet, incloent tots aquells elements necessaris per a la seva correcta instal·lació, posada en marxa i funcionament.

En el preu del contracte s'inclou l'entrega a l'espai físic concret designat per l'IREC, a la direcció exposada en el present PPT, la instal·lació i posada en marxa de l'equip i tots els seus components, així com els costos de transport fins l'espai físic designat, i les possibles taxes d'exportació i/o importació. Tots els tests de funcionament de l'equip s'hauran de realitzar a l'IREC.

Un cop instal·lat, s'impartirà la corresponent formació al personal designat per l'IREC per l'aprofitament i ús de l'equip, en els termes exposats a la Clàusula 3.3 del present PPT.

L'adjudicatari serà el responsable del deure de custòdia i emmagatzematge de l'equip i complements a subministrar fins el moment de la recepció d'aquests per part de l'IREC.

La recepció de l'equip es formalitzarà amb la corresponent acta de recepció, que tindrà lloc en el moment en què s'hagi entregat l'equip, s'hagi confirmat la seva correcta instal·lació i comprovat el seu funcionament, i executat la formació del personal. Un cop s'hagi comprovat que s'han executat de manera conforme per l'IREC les prestacions anteriors, se signarà l'acta de recepció, com a màxim, dins dels 20 dies naturals següents, moment en el qual començarà el període de garantia.

En el supòsit que en el moment d'aixecar-se l'acta de recepció sorgissin incidències, no s'iniciarà el període de garantia, sinó que es donarà un termini màxim de 20 dies naturals a l'adjudicatari perquè procedeixi a l'esmena dels defectes observats o procedeixi, en el seu cas, a la substitució de l'equip o del component de l'equip en el que s'hagi observat el defecte. Transcorregut aquest termini, es portaran a terme les oportunes actuacions dirigides a comprovar la conformitat de les prestacions als efectes que s'iniciï el període de garantia, en els termes previstos en la Clàusula 6 del present PPT.

5. EXECUCIÓ DEL CONTRACTE

5.1 Termini d'implantació

El termini màxim pel subministrament, ubicació, instal·lació, posada en marxa i formació en l'ús de l'equipament serà de 8 mesos en total, a comptar des de l'endemà de la formalització del contracte, amb el següents sub-terminis:

Subministrament: s'haurà de produir en el termini màxim de 6 mesos a comptar des de l'endemà de la formalització del contracte.

Instal·lació i posada en marxa: s'haurà de produir en el termini màxim d'1 mes a comptar des que s'hagi efectuat el subministrament. En el cas que el subministrament s'hagués endarrerit per causes no imputables a l'IREC, el termini d'instal·lació i posada en marxa s'haurà de reduir de manera que no se superi el termini total d'execució previst.

Formació: haurà d'estar finalitzada en el termini màxim d'1 mes a comptar des de la posada en marxa. En el cas que el subministrament i/o la instal·lació i posada en marxa s'haguessin endarrerit per causes no imputables a l'IREC, el termini de formació s'haurà de reduir de manera que no se superi el termini total d'execució previst.

En qualsevol dels supòsits anteriors, els terminis es poden reduir o optimitzar per part de l'adjudicatari, sense càrrec addicional per l'IREC.

5.2 Suport i atenció a l'usuari

Durant la totalitat de la vida útil de l'equip, l'empresa adjudicatària disposarà dels suficients mitjans tècnics, materials i personals per proporcionar el suport per a la resolució d'incidències respecte a avaries, ús de l'equip i les seves aplicacions, així com per a la resolució de problemes o incidències del software. Aquest servei complirà les següents condicions mínimes:

- El mitjà de comunicació del suport es prestarà per consultes a través de correu electrònic o sistema de tickets de consultes de l'empresa adjudicatària per internet, en idioma català, castellà o anglès.
- L'horari d'atenció serà de dilluns a divendres laborables.
- El temps màxim de primera resposta a una consulta o notificació d'incidència serà de 8 hores laborables.
- Disposarà de suport tècnic remot.

6. GARANTIA

Garantia mínima: 1 any.

La garantia inclourà: la substitució de l'equip o reparació, segons procedeixi; desplaçaments del personal tècnic o trasllat de l'equip a la fàbrica; mà d'obra; peces de recanvi i elements necessaris per a proves de funcionament i tots aquells altres elements que siguin necessaris per a la reparació de l'equip i components del mateix.

La garantia tindrà com a data d'inici la data de l'acta de recepció, que es produirà un cop s'hagi finalitzat la totalitat de la implementació, en els termes descrits en la Clàusula 4 del present PPT.

Les empreses licitadores podran ampliar el termini de garantia sense cost addicional per l'IREC.

7. FORMES DE SEGUIMENT I CONTROL DE L'EXECUCIÓ

L'IREC designarà una persona responsable del contracte que assumirà el control i la coordinació de l'execució contractual amb l'empresa contractista a fi de tractar directament les qüestions relacionades amb el desenvolupament de les prestacions indicades en aquest plec.

L'empresa contractista ha de designar una persona responsable a qui encarregarà la gestió de l'execució del contracte i que haurà de garantir la qualitat de la prestació objecte d'aquest plec, tractant directament les qüestions relacionades amb el desenvolupament de les prestacions indicades en aquest plec amb la persona interlocutora designada per l'IREC.

8. DOCUMENTACIÓ TÈCNICA A APORTAR PER LES EMPRESES LICITADORES

Les especificacions tècniques proposades per l'empresa licitadora en la seva oferta esdevindran condicions d'obligat compliment al llarg de l'execució del contracte si aquesta esdevé l'adjudicatària.

A fi d'acreditar el compliment de cada especificació tècnica exigida en aquest plec, l'empresa licitadora haurà d'aportar amb l'oferta, en concret, amb la documentació aportada al Sobre nº 2, la documentació següent:

- Memòria tècnica descriptiva on l'empresa licitadora descrigui, punt per punt, com la seva oferta compleix cadascuna de les especificacions tècniques dels apartats 3.1 a 3.3 d'aquest plec. S'haurà d'indicar clarament la marca, el model i les característiques de l'equip principal i de tots els seus components, de manera que l'òrgan de contractació pugui determinar amb aquesta informació si l'oferta compleix o no compleix amb els requeriments tècnics requerits en el present plec. Es detallaran la proposta de formació i el servei de suport tècnic.
- Fitxes tècniques o documents equivalents originals del fabricant de tots els equips i components oferts, on es puguin verificar les característiques tècniques exigides.
- Aprovació de tipus d'aparell radioactiu, publicada al Butlletí Oficial de l'Estat (BOE), o documentació que n'acrediti la seva aprovació, encara que no s'hagi produït la publicació.
- Declaració de Conformitat CE de l'equip, que acrediti el compliment de les directives europees aplicables, inclosa la Directiva 2006/42/CE sobre maquinària.

9. **MILLORES**

Com a prestacions addicionals als requisits tècnics mínims que haurà de comptar l'equipament, IREC valorarà dins els criteris d'adjudicació, que es detallen al Plec de Clàusules Administratives, les següents característiques:

9.1. **Prestacions tècniques**

- Plataforma '*Euler Cradle*' de 5 eixos (Chi, Phi, X, Y, Z) motoritzats.
- Sistema de posicionament motoritzat i precís X, Y i Z de mostres (ja sigui en la plataforma '*Euler Cradle*' o en una altra plataforma '*XYZ*'), mitjançant sistema òptic controlat pel software, que permeti la localització precisa de les mostres i de les diferents zones de la plataforma, per a controlar i optimitzar la zona d'irradiació a les mostres i la funció de mapping, i desplaçament automàtic a les següents mostres i possibilitat d'aplicar diferents metodologies i selecció d'elements òptics a les diferents mostres.
- Intercanvi d'elements òptics totalment automatitzat, i sense intervenció manual, per a tot el rang d'aplicacions descrites en aquest plec (ie. Bragg-brentano, XRR, GIXRD, HRXRD, RSM, Pole figures).
- Detector 2D: major àrea.

9.2. **Mòduls addicionals**

- Mòdul porta-mostres amb rotació en Phi, vàlid tant per a reflexió com per a transmissió, per a mostres de pols en configuració Bragg-Brentano.
- Mòdul porta-mostra '*air-tight*', per a poder muntar-hi la mostra dins d'una *Glove-box* i poder fer mesures d'XRD evitant el contacte de la mostra amb l'aire.

- Suport o mòdul necessaris per a realitzar experiments en *Pouch cells*, per a estudis *In-situ/operando* en geometria de transmissió.
- Analitzador en el feix difractat amb monocromador híbrid 3-bounce o 2-bounce de Ge (220), i detector puntual en cas de ser necessari, per a millorar la resolució de RSM.
- Radiació de Mo i la seva òptica específica per a la mesura de bateries en mode transmissió.

9.3. Software de tractament de dades

- Anàlisi de Rocking Curves, RSM i Pole Figures, amb càlculs basats en posicions de pics, per calcular *mismatch*, *composition*, *thickness* i *relaxation*
- Anàlisi de *Reflectivity Curves* per a calcular gruixos de capes.

9.4. Manteniment Preventiu i Garantia

- Increment d'anys del període de garantia amb manteniment preventiu.

Les millores proposades seran a càrrec de l'empresa adjudicatària, sense que es pugui sol·licitar cap mena de preu addicional per a la seva execució.

A Sant Adrià de Besòs a la data de la signatura electrònica.

Albert Llorente Mola, Ph.D

Responsable del Laboratori de Materials Avançats per a l'Energia
Àrea de Materials Avançats per a l'Energia
Fundació Institut de Recerca en Energia de Catalunya