

Fundació Institut Català d'Investigació Química

PLEC DE PRESCRIPCIONS TÈCNIQUES PER A LA CONTRACTACIÓ, PEL PROCEDIMENT OBERT, SUBJECTA A REGULACIÓ HARMONITZADA, DEL SUBMINISTRAMENT I INSTAL·LACIÓ D'UN DIFRACTÒMETRE DE RAIG X DE MONOCRISTALL PER A L'INSTITUT CATALÀ D'INVESTIGACIÓ QUÍMICA.

EXP: 02-2026

PLEC DE PRESCRIPCIONS TÈCNIQUES PER A LA CONTRACTACIÓ, PEL PROCEDIMENT OBERT, SUBJECTA A REGULACIÓ HARMONITZADA, DEL SUBMINISTRAMENT I INSTAL·LACIÓ D'UN DIFRACTÒMETRE DE RAIG X DE MONOCRISTALL PER A L'INSTITUT CATALÀ D'INVESTIGACIÓ QUÍMICA.

1. Objecte de contracte

L'objecte del present contracte és el subministrament d'un sistema complet de difracció de raigs X de monocristall per la determinació d'estructures cristal·lines i moleculars. L'equip ha de disposar de dues fonts de radiació (Cu i Mo), un detector, un goniòmetre i un sistema de refrigeració de cristalls. També haurà de disposar d'un sistema robotitzat automàtic per al cribratge de plaques amb pous de mostra en forma de pols cristal·lina o monocristalls. A més ha de disposar d'una estació de treball i programari per al maneig de l'equip i el tractament de les dades.

L'equipament ha d'estar instal·lat dins una cabina de protecció radiològica comptant amb tots els components necessaris per al funcionament de l'equip amb les propietats descrites. El components principals de l'equip estan descrits a l'apartat 2 (característiques tècniques).

La compra és necessària per tal de millorar el servei de Difracció de RX i donar així una millor qualitat en el procés d'investigació dels diferents grups d'Investigadors del ICIQ.

2. Característiques tècniques

Les característiques tècniques mínimes requerides per a l'objecte de contracte s'especifiquen seguidament.

2.1. Generalitats

- L'equip objecte de contracte ha de tenir marcatge CE.
- Les parts principals de l'equip hauran d'estar instal·lades dins una cabina de protecció radiològica.
- L'equipament ha d'estar homologat segons la normativa de radiacions ionitzants actual definida per al Consejo de Seguridad Nuclear del Govern Espanyol. Hauria de poder funcionar en un espai no controlat.
- S'ha de poder instal·lar en un espai de dimensions: 250 cm x 250 cm x 250 cm.

2.2. Fonts de radiació de Raig X:

- Fonts de radiació basades en ànodes rotatoris de molibdè i coure d'alta brillantor que proporcionin raigs X amb longituds d'ona de 1.54178 Å i 0.71073 Å. L'equip haurà de permetre canviar fàcilment i de manera automatitzada entre les radiacions de coure i de molibdè.

2.3. Òptiques :

- Sistema òptic confocal d'alt flux per a les radiacions K α de coure i molibdè amb òptiques intel·ligents per a un auto-alineament continu de la radiació de raigs X en condicions òptimes.

2.3. Goniòmetre:

- Goniòmetre Kappa de quatre cercles.

2.4. Detector:

- Detector de raigs X híbrid amb recompte de fotons corbat i una resolució angular mínima de 100°.

2.5. Software i control de l'equip:

- L'equip a de disposar d'un programari que permeti mesurar i processar les dades dels cristalls mesurats (un mínim de 10 llicències).
- L'equip ha de disposar d'un programari que permeti refinar i processar les dades dels monocristalls fins obtenir un CIF publicable (un mínim de 10 llicències).
- L'equipament ha de disposar d'un programari que controli el sistema robotitzat automàtic per al cribratge de plaques amb pous.
- L'equipament ha de disposar d'un programari amb les llicències necessàries (un mínim de 10 llicències) que permeti processar les dades de difracció de pols fins a obtenir difractograms de pols de nivell publicable.
- L'equipament ha de disposar d'un programari que permeti fer refinats amb Rietveld amb l'objectiu de fer quantificacions, determinacions del límit de detecció i determinacions estructurals (resolució i refinat) a partir de dades de difracció de pols (un mínim de 2 llicències).

2.6. Accessoris

- Sistema criogènic que permeti realitzar mesures controlades en el rang entre -173 °C i 227 °C. Aquest accessori a de ser redundat i que asseguri el funcionament de les mesures a la temperatura de -173 °C.
- Sistema robotitzat automàtic per al cribratge de plaques amb pous de mostra que continguin mostres en forma de pols cristal·lina o monocristalls.
- En cas de que sigui necessari, l'equip ha de disposar d'una refrigeradora per al refredament del generador i altres components de l'equip.

3. Capacitat de l'Equip

L'empresa licitadora haurà d'adjuntar a la memòria tècnica, els resultats de les mesures demanades als apartats 3.1 i 3.2.

3.1. L'equip haurà de ser capaç, emprant radiació de coure i molibdè, i les condicions descrites en aquest apartat, de mesurar un monocristall de **sacarosa**.

Condicions de mesura per al test de monocristall (3.1):

Mostra: Sacarosa (monoclínic, $P2_1$). Mida del cristall: inferior a 40 µm en qualsevol direcció o volum inferior a 0,00007 mm³. Muntatge: MicroLoop de MiTeGen o MicroMount de doble gruix de 50 µm o més petit, de manera que la mida del cristall es pugui comparar fàcilment amb la mida del llaç. (S'han de proporcionar una imatge del cristall sense el llaç, un vídeo del cristall i la mida del muntatge.)

Objectius de la mesura:

- Amplada d'escaneig de 0,5° per fotograma.

- Completitud total en la simetria del grup espacial fins a 0,60 Å (Mo) o 0,81 Å (Cu) de resolució.
- Redundància mitjana mínima de 5 en el grup espacial. (Cal proporcionar la documentació del càlcul d'estratègia.)

Temperatura de la mesura: 100 K

Temps de mesura (incloent-hi temps de desplaçament): 1 h per a Mo i 15 min per a Cu, o tan ràpid com sigui possible. (Això dona lloc a temps d'exposició de l'ordre de magnitud de 2 s/0,5° per a Mo i 0,05 s/0,5° per a Cu.)

Processament de dades: Integració estàndard; escalat; correcció d'absorció numèrica i empírica; sense model d'error (els errors experimentals s'han de mantenir per preservar la comparabilitat de les dades) i amb model d'errors. Refinament d'estructura amb SHELXL utilitzant IAM estàndard. S'han de proporcionar els fitxers metafinals complets del processament de dades.

3.2. L'equip haurà de ser capaç de mesurar una mostra de pols cristal·lina de **cistina** amb radiació de molibdè i de coure (una mesura en cada radiació), emprant el sistema robotitzat que doni una resolució de pic el més a prop possible de 0.05 ° en 2θ, i en les condicions de mesura descrites en aquest apartat.

Condicions de mesura per al test de difracció de pols cristal·lina (3.2):

L'equip haurà de ser capaç de mesurar una mostra de pols cristal·lina de **Cistina** (fase ortoròmbica P212121, $a \approx 5.32$ Å, $b \approx 12.14$ Å, $c \approx 56.13$ Å, $V = 3620$ Å³; $Z = 8$) amb radiació de molibdè i de coure (una mesura en cada radiació) i emprant el sistema robotitzat que doni una resolució de pic el més a prop possible de 0.05 ° en 2θ. El rang de mesura serà de 4° a 40° en 2θ.

4. Manteniment i servei post-venda

4.1. L'empresa licitadora ha de tenir servei tècnic i laboratori d'aplicacions, per tal de donar un suport tècnic i científic adequat.

4.2 L'empresa licitadora ha de proporcionar servei remot per a resoldre possibles dubtes sobre el funcionament de l'equip, fer diagnòstic d'avaries i poder arribar a resoldre determinades avaries.

4.3 El licitador presentarà un pressupost formal per a un contracte de manteniment preventiu i correctiu anual que cobreixi tot l'equip i inclogui:

- Revisió general de l'equip
- Neteja completa de l'equip
- Canvi del material fungible
- Mà d'obra
- Desplaçament
- Reparació de qualsevol averia de l'equip
- Peces necessàries per a qualsevol reparació de l'equip

En cas de ser l'adjudicatari, aquest pressupost es considerarà vinculant durant tota la vida de l'equip, variant el preu només en funció de la variació de l'IPC.

5. Millores

Es valorarà com a millora en l'oferta el següent:

- Oferiment d'un manteniment preventiu complet de l'equip durant el període de garantia. S'entén com manteniment preventiu de l'equip una revisió general i neteja d'aquest i el canvi de tots els fungibles de l'equip, amb desplaçament i mà d'obra inclosos.
- Pla de formació: funcionament bàsic del equip i opcions avançades.
- L'oferiment d'una ànode/tub de recanvi addicional.

6. Interlocutors

- L'adjudicatari nomenarà un interlocutor vàlid per resoldre les qüestions derivades del funcionament general del subministrament.
- L'interlocutor de l'ICIQ serà la persona que es designi a tal efecte, pertanyent a les *Scientific Core Facilities*.

7. Període de garantia

Garantia per a tot l'equip en conjunt: mínim 1 any.

S'entén per garantia la reparació de l'equip sense cap cost sempre i quan la reparació no sigui necessària degut a un mal ús de l'equip.

8. Termini de lliurament

El termini de lliurament queda fixat en un màxim de 24 setmanes a comptar des de la data de signatura del contracte.

9. Reducció de l'impacte ambiental del subministrament

Es valorarà que l'empresa adjudicatària compleixi amb els següents criteris en matèria mediambiental:

- Que l'empresa licitadora disposi d'una política mediambiental implantada a l'empresa que ajudi a reduir l'impacte ambiental del subministrament objecte del contracte. Si se'n disposa caldrà adjuntar-la.
- Els materials utilitzats en l'embalatge, protecció i transport dels subministraments seran preferiblement reciclats i novament reciclables o reutilitzables. Incorporaran les impressions estrictament necessàries per efectuar la correcta identificació, traçabilitat i transport del subministrament i no s'hi utilitzaran tintes que continguin substàncies nocives per al medi o amb continguts en metalls. Caldrà acreditar aquest requisit mitjançant declaració responsable prèvia al transport i podrà ser contrastat durant el subministrament.
- El desembalatge i recollida de residus generats durant el subministrament i instal·lació de l'equip correrà a càrrec de l'adjudicatari. L'adjudicatari retirarà els residus del centre i en farà un tractament responsable d'acord amb la legislació vigent. Aquesta mesura es justificarà aportant una declaració responsable i un cop realitzat el servei, aportant la corresponent identificació de l'empresa o empreses de residus acreditades que es faran càrrec de la seva gestió.

- Els mitjans de transport terrestres emprats durant el transport del subministrament seran de baixes emissions. Aquesta mesura es justificarà aportant una declaració responsable i, un cop realitzat el servei, aportant la certificació de l'empresa de transports que així ho acrediti o la fitxa tècnica del vehicle utilitzat en el subministrament on es puguin contrastar les generacions dels motors i els nivells d'emissió.

En cas d'oferir aquestes mesures i finalment incomplir-les suposarà l'aplicació de les corresponents penalitzacions establertes en els Plecs de Clàusules Particulars.

10.- Pressupost de licitació

El pressupost de licitació és de 780.000,00 € (IVA exclòs).

Aquest equipament/contracte és part de l'ajuda EQC2024-007935-P, finançada per MICIU/AEI/10.13039/501100011033 i per FEDER/UE.

11. Lloc de lliurament

L'adjudicatari instal·larà l'equipament subministrat a la seva ubicació definitiva dins el laboratori de Difracció de Raig X de l'ICIQ.

Tarragona, 14 de gener de 2026.

Dr. Jordi Benet Buchholz

Responsable de la Unitat de Difracció
Fundació Institut Català d'Investigació Química