

**PLIEGO DE PRESCRIPCIONES TÉCNICAS DEL EQUIPO DE DIFRACCIÓN  
DE RAYOS-X DE MONOCRISTAL**

**Objeto del contrato**

Suministro de un equipo de difracción de rayos X para muestras monocristalinas equipado con una fuente de radiación de molibdeno y accesorio de temperatura variable.

**Prescripciones técnicas**

1.- Descripción genérica del equipo.

Difractómetro automático de rayos-X para medir muestras monocristalinas, con longitud de onda de molibdeno, goniómetro kappa de cuatro círculos y detector de última generación, para obtener datos completos incluso con cristales de baja simetría. Debe estar equipado con un sistema para la toma de datos a temperatura variable, que permita la medida hasta temperaturas próximas a la del nitrógeno líquido.

El equipo debe disponer de un sistema informático integrado que permita el control simultáneo de la fuente de radiación, del goniómetro y del manejo y lectura del detector; debe asimismo posibilitar la correcta integración de las imágenes primarias y su transformación en datos utilizables por los programas convencionales de resolución y refinamiento de estructuras. El equipo suministrado debe incorporar software adecuado para la resolución y tratamiento de los datos medidos en el difractómetro, tanto para estructuras convencionales como para el tratamiento de medidas de especial complejidad.

2.- El licitador que resulte propuesto como adjudicatario del presente contrato deberá aportar la documentación que acredite que el equipo ofertado es conforme con el reglamento sobre instalaciones radiactivas aprobado por Real Decreto 1836/1999, de 3 de diciembre que establece los requisitos y la documentación a presentar con respecto a la aprobación de tipos de aparatos productores de radiaciones ionizantes.

Dicho compromiso se solicita para que su uso esté exento de autorización como instalación radiactiva y que no sea necesaria una licencia de supervisor u operador, expedida por el Consejo de Seguridad Nuclear. Esta medida viene justificada por la instalación del equipo en un laboratorio con acceso público.

3.- El equipo propuesto deberá incluir los siguientes componentes y cumplir las prescripciones técnicas indicadas a continuación:

- 3.1.- Tubo microfuelle de alto brillo con ánodo de molibdeno. Se valorará el aumento de intensidad originado por la posibilidad de usar la microfuelle con potencias superiores a 50 w.
- 3.2.- Generador de alto voltaje (50 kV) y baja potencia (mínimo rango 0-50 w) para la microfuelle. Se valorará si el generador puede superar los 50 w de potencia.
- 3.3.- Sistema óptico de multicapas para focalizar el haz de rayos X de alta intensidad sobre los cristales objeto de estudio. Tamaño de haz en la posición de la muestra  $\leq 0.120$  mm. Divergencia del haz  $\leq 5$  mrad. Sistema de colimación y beam-stop para la radiación.

<b>Código Seguro De Verificación:</b>	Dq4PJzCNKb52f1HXMtSLw==	<b>Estado</b>	<b>Fecha y hora</b>	
<b>Firmado Por</b>	Jesús Cano Sierra - Director/a del C.a.i. de "química"	Firmado	27/07/2020 18:26:34	
<b>Observaciones</b>		<b>Página</b>	1/4	
<b>Url De Verificación</b>	<a href="https://vfirma.uah.es/vfirma/code/Dq4PJzCNKb52f1HXMtSLw==">https://vfirma.uah.es/vfirma/code/Dq4PJzCNKb52f1HXMtSLw==</a>			

3.4.- Goniómetro de 4 círculos con geometría kappa de alta precisión (esfera de confusión  $\leq 0.010$  mm) controlado mediante software de manera automática y con sistema de protección frente a colisiones. Debe incluir control motorizado de la separación cristal-detector en el rango 30-200 mm.

3.5.- Cabeza goniométrica XYZ acorde con las normas IUCr (ajuste mínimo en cada eje 2.5 mm). Se valorará que la cabeza ofertada sea motorizada, controlada desde el sistema informático de control del goniómetro.

3.6.- Cristal 'test' calibrado con documentación sobre la calibración. Deberá incluirse la descripción del protocolo a realizar para el control y la alineación de los sistemas de referencia del goniómetro.

3.7.- Detector bidimensional de última generación con alta sensibilidad, ganancia, velocidad de medida, precisión y rango dinámico para radiación de molibdeno. Control de los parámetros de funcionamiento del detector, incluido su movimiento, mediante software. Dimensión mínima activa de  $70 \times 75$  mm<sup>2</sup>. Refrigeración directamente por aire.

Se valorará el aumento de superficie activa del detector.

3.8.- Vídeo microscopio de alta resolución en color para el centrado de muestras en el difractor con sistema de iluminación interna, pantalla para centrado del cristal integrada dentro de la cabina de seguridad para facilitar el centrado de la muestra. El uso del microscopio debe estar integrado en el sistema de control del goniómetro, disponiendo de protocolos para el modelado/indexado de las caras cristalinas.

3.9.- Cabina de seguridad antirradiación provista con doble circuito de seguridad. El sistema ofertado debe presentar total compatibilidad con actualización a sistema de doble fuente.

Tal como se indica en el punto 2 de estas prescripciones técnicas, el licitador que resulte propuesto como adjudicatario del contrato deberá acreditar que el equipo en su conjunto y la cabina de seguridad, en particular, cumplen la normativa europea y española sobre protección contra las radiaciones ionizantes por rayos-X.

3.10.- Sistemas de refrigeración y/o de vacío necesarios para el adecuado funcionamiento de las partes anteriormente descritas: fuente, óptica, generador, detector... .

3.11.- Sistema de baja temperatura mediante nitrógeno líquido adecuado para hacer la medida de forma rutinaria a 100K de las muestras cristalinas, con un Termo Dewar de al menos 50 litros para el suministro de nitrógeno líquido y sistema automático de relleno. Software de control desde el ordenador. Todos los accesorios necesarios para que este sistema funcione en condiciones óptimas y que no haya condensaciones ni hielo sobre las muestras durante la medida.

3.12.- Equipo informático para el manejo y control integrado del difractor (generador, goniómetro, detector y sistema de temperatura variable) y para el tratamiento ágil de las imágenes medidas. Características mínimas: procesador con arquitectura x86 de 64 bits, memoria RAM 16 GB, disco duro 2 TB, tarjeta de red Ethernet 10/100/1000 con conector RJ45, tarjeta gráfica de última generación, puertos de comunicación USB3 y USB-C, y monitor LED de al menos 24". Sistema operativo compatible con el software de control del difractor.

<b>Código Seguro De Verificación:</b>	Dq4PJzCNKb52f1HXMtSlLw==	<b>Estado</b>	<b>Fecha y hora</b>
<b>Firmado Por</b>	Jesús Cano Sierra - Director/a del C.a.i. de "química"	Firmado	27/07/2020 18:26:34
<b>Observaciones</b>		<b>Página</b>	2/4
<b>Url De Verificación</b>	<a href="https://vfirma.uah.es/vfirma/code/Dq4PJzCNKb52f1HXMtSlLw==">https://vfirma.uah.es/vfirma/code/Dq4PJzCNKb52f1HXMtSlLw==</a>		



3.13.- Equipo informático servidor, de características técnicas idénticas al del punto 3.12, conectado con el equipo informático de control del difractómetro (punto 3.12), dedicado al procesamiento y al almacenamiento de datos.

3.14.- Programa informático para el manejo y control integrado del difractómetro, generador y sistema de temperatura variable, así como para la evaluación de la muestra, y la adquisición y el tratamiento de datos. Este programa debe realizar procesos de indexado en cristales complicados, cálculos de estrategias de medida, visualización de la red recíproca, integración de las medidas, escalado y corrección de absorción para datos de monocristal. El software debe ser capaz de orientar el cristal en cualquier dirección cristalina especificada o en cualquier dirección definida en el sistema de referencia del laboratorio. Este programa debe permitir el tratamiento de situaciones no estándar: estructura de maclas, multicristales, estructuras moduladas, experimentos de polvo cristalino, etc. Debe generar, asimismo, datos primarios compatibles con otros sistemas de integración (HKL2000, XDS, CrysAlis o APEX3).

Incluirá la actualización gratuita del software durante un mínimo de cinco años.

3.15.- Programa informático para la resolución, refinamiento, representación y publicación de estructuras cristalinas. Licencia multiusuario para, al menos, 10 usuarios.

Incluirá la actualización gratuita del software durante un mínimo de cinco años.

3.16.- Documentación a incluir: manuales de uso y mantenimiento del equipo, del software y del material complementario (sistemas de refrigeración del equipo y de las muestras) en formato electrónico y formato papel.

3.17.- Se incluye un curso de formación que constará de dos partes y se realizará en fechas diferenciadas, según lo siguiente:

1) Curso de manejo básico para el manejo y mantenimiento del equipo, protocolos de alineación, diseño de estrategias específicas de medida, tratamiento de datos y uso básico de las principales aplicaciones del sistema integrado de control y medida equipo. Se realizará una vez instalado el equipo, con una duración de dos jornadas, en horario de 9-17h, al que asistirán un máximo de 5 personas.

2) Curso de manejo avanzado del software de control y medida, acciones de mantenimiento y comprobación de la calidad de los datos. Se realizará un mes después de la instalación del equipo, con una duración de dos jornadas, en horario de 9-17 h., y asistirán un máximo de 5 personas.

Ambos cursos deberán ser impartidos por técnicos de aplicaciones de fábrica y se realizarán en las instalaciones del CAI en Química de la Universidad de Alcalá (UAH).

3.18.- El equipo ofertado deberá incluir un sistema de evaluación remota del funcionamiento del equipo, por parte de los técnicos de la empresa suministradora. El licitador que resulte adjudicatario de este contrato, durante la instalación del equipo, comprobará el correcto funcionamiento de este sistema.

4.- Se incluye con el suministro:

<b>Código Seguro De Verificación:</b>	Dq4PJzCNKb52f1HXMtSlLw==	<b>Estado</b>	<b>Fecha y hora</b>	
<b>Firmado Por</b>	Jesús Cano Sierra - Director/a del C.a.i. de "química"	Firmado	27/07/2020 18:26:34	
<b>Observaciones</b>		<b>Página</b>	3/4	
<b>Url De Verificación</b>	<a href="https://vfirma.uah.es/vfirma/code/Dq4PJzCNKb52f1HXMtSlLw==">https://vfirma.uah.es/vfirma/code/Dq4PJzCNKb52f1HXMtSlLw==</a>			

4.1.- Transporte, instalación y puesta en marcha del equipo solicitado.

4.2.- Dado que el nuevo equipo debe ir instalado en el lugar donde, actualmente, se encuentra un difractor Bruker Nonius KappaCCD, la empresa adjudicataria deberá encargarse de la desinstalación y retirada del equipo obsoleto, que se encuentra ubicado en el laboratorio de rayos-X del CAI en Química de la UAH, para su reciclaje.

5.- La garantía incluirá: sustitución del equipamiento o reparación según proceda, desplazamientos del personal técnico o traslado del equipamiento a fábrica, mano de obra, piezas de repuesto y elementos necesarios para pruebas de funcionamiento (exceptuando suministro eléctrico, agua, gas; en caso de reparación del equipamiento in situ). Incluirá también mantenimiento preventivo, en concreto las tareas de revisión de equipos y sustitución de piezas, de acuerdo con los protocolos del fabricante del equipamiento, incluyendo desplazamientos, mano de obra y piezas.

El licitador que resulte propuesto como adjudicatario del presente contrato se compromete a prestar asistencia técnica y proporcionar piezas de recambio del material ofertado durante, al menos, los cinco años posteriores a la terminación del plazo de garantía.

Director del CAI de Química

<b>Código Seguro De Verificación:</b>	Dq4PJzCNKb52f1HXMtSlLw==	<b>Estado</b>	<b>Fecha y hora</b>	
<b>Firmado Por</b>	Jesús Cano Sierra - Director/a del C.a.i. de "química"	Firmado	27/07/2020 18:26:34	
<b>Observaciones</b>		<b>Página</b>	4/4	
<b>Url De Verificación</b>	<a href="https://vfirma.uah.es/vfirma/code/Dq4PJzCNKb52f1HXMtSlLw==">https://vfirma.uah.es/vfirma/code/Dq4PJzCNKb52f1HXMtSlLw==</a>			