

Dostawa dyfraktometru monokrystalicznego  
dla Wydziału Chemii Uniwersytetu Wrocławskiego

## **OPIS PRZEDMIOTU ZAMÓWIENIA**

### **I. Specyfikacja monokrystalicznego dyfraktometru rentgenowskiego:**

Przedmiotem zamówienia jest fabrycznie nowy (nieużywany, nie będący przedmiotem ekspozycji i wystaw) 4-kołowy monokrystaliczny dyfraktometr rentgenowski o geometrii Kappa wraz z przystawką niskotemperaturową przeznaczony do zastosowań w zakresie badań chemicznych, biologicznych, fizycznych i materiałoznawstwa.

Oferowany aparat musi zapewniać uniwersalność niezbędną do przeprowadzenia szerokiego zakresu przewidywanych badań: związków koordynacyjnych, materiałów metaloorganicznych, materiałów nieorganicznych i organicznych, białek, kwasów nukleinowych, preparatów farmaceutycznych, w tym solwatów, polimorfów, kokryształów. Badane próbki będą obejmować materiały tworzące wyjątkowo małe kryształy lub kryształy słabo rozpraszające promieniowanie rentgenowskie. Szerokie możliwości aparatu obejmować mają również badania materiałów silnie absorbujących promieniowanie rentgenowskie, ulegających przemianom fazowym, kryształów zbliźniaczonych i o strukturze modulowanej, a także wyznaczanie konfiguracji absolutnej i analizę rozkładu gęstości elektronowej. Aby spełnione zostały powyższe wymogi aparat powinien posiadać bardzo jasne źródło promieniowania rentgenowskiego, detektor o wysokiej czułości i dużej szybkości oraz komputer wyposażony w elastyczne i wydajne oprogramowanie do gromadzenia i analizy danych.

### **II. Ogólne wymagania systemowe dotyczące aparatury:**

1. system musi być zamknięty w przestronnej szafie izolującej od promieniowania jonizującego, zabezpieczonej wyłącznikami bezpieczeństwa we wszystkich punktach dostępnych dla użytkownika, aby zapewnić odpowiednie bezpieczeństwo przed promieniowaniem rentgenowskim
2. system musi zawierać obudowę chroniącą przed promieniowaniem jonizującym, która spełnia obecne normy promieniowania UE: zgodne z najwyższymi standardami bezpieczeństwa rentgenowskiego odpowiednimi dla klasy sprzętu, w pełni chroniąc użytkowników przed przypadkowym narażeniem na promieniowanie rentgenowskie.
3. wszystkie urządzenia wchodzące w skład Systemu winny posiadać oznakowanie CE
4. dostawca systemu musi przedstawić dowody, że system zapewnia uzyskanie danych o jakości umożliwiającej ich opublikowanie

### **III. Wymagania systemowe źródła / generatora promieniowania rentgenowskiego:**

1. w celu jak najszerszego zastosowania sprzętu i umożliwienia gromadzenia danych dyfrakcyjnych dla bardzo małych i słabo rozpraszających kryształów dostępne musi być promienie rentgenowskie o bardzo wysokiej jasności w charakterystycznych dla anody Mo K $\alpha$  (0,71 Å) i Cu K $\alpha$  (1,54 Å) długościach fal
2. przełączanie między źródłem promieniowania Mo(K $\alpha$ ) i Cu(K $\alpha$ ) musi być w pełni zautomatyzowane: łatwe do zainicjowania za pomocą oprogramowania sterującego przyrządem i ukończone bez żadnej innej interwencji ze strony użytkownika
3. źródła promieniowania rentgenowskiego muszą posiadać zoptymalizowaną, wielowarstwową optykę monochromatyzującą/ogniskującą konfokalną z podwójnym odbiciem

4. źródło promieniowania rentgenowskiego Mo(K<sub>α</sub>) musi mieć moc znamionową co najmniej 1000 W, a średnica wiązki (FWHM) w pozycji kryształu musi mieścić się w zakresie 200–275 μm, a maksymalna rozbieżność ≤ 4,0 mrad
5. źródło promieniowania rentgenowskiego Cu(K<sub>α</sub>) musi mieć moc co najmniej 1000 W, a średnica wiązki (FWHM) w pozycji kryształu musi mieścić się w zakresie 200 - 275 μm, przy maksymalnej rozbieżności ≤ 5 mrad
6. w celu optymalnego oddzielenia refleksów na obrazach dyfrakcyjnych źródła promieniowania rentgenowskiego muszą być wyposażone w funkcję zmiany rozbieżności wiązki. Urządzenia do zmiany rozbieżności muszą być w pełni zautomatyzowane (sterowane programowo) i umożliwiać ciągłą regulację źródeł Mo(K<sub>α</sub>) i Cu(K<sub>α</sub>) w całym ich zakresie rozbieżności wiązki promieniowania rentgenowskiego. Funkcja ta jest ważna w przypadku kryształów o bardzo dużych stałych sieciowych
7. źródło promieniowania Mo(K<sub>α</sub>) musi generować wiązkę o gęstości strumienia co najmniej 5 x 10<sup>9</sup> fotonów / (s \* mm<sup>2</sup>) na kryształ
8. źródło promieniowania Cu(K<sub>α</sub>) musi generować wiązkę o gęstości strumienia co najmniej 5 x 10<sup>10</sup> fotonów / (s \* mm<sup>2</sup>) na kryształ

#### **IV. Wymagania dotyczące detektora promieniowania rentgenowskiego:**

1. dla uzyskania najlepszego stosunku sygnału do szumu w danych dyfrakcyjnych, detektor promieniowania rentgenowskiego musi być urządzeniem bezpośrednio zliczającym fotony, wykorzystującym półprzewodnikowy czujnik pikselowy: bez użycia luminoforu do konwersji promieniowania rentgenowskiego na światło widzialne
2. detektor musi mieć rozmiar w pikselach równy lub mniejszy niż 100 x 100 μm<sup>2</sup>
3. detektor winien obejmować swoim zakresem 2θ co najmniej 134 °, aby umożliwić osiągnięcie rozdzielczości wymaganej przez IUCr z jednego położenia detektora przy zastosowaniu promieniowania Cu(K<sub>α</sub>) (1,54Å).
4. specjalnie do zastosowań w krytalografii białek, detektor winien mierzyć do rozdzielczości 1,25 Å na jednym obrazie: w celu zminimalizowania skutków uszkodzenia przez promieniowanie przy jednoczesnym zmaksymalizowaniu wydajności gromadzenia danych z kryształów białka.
5. detektor musi mieć:
  - a) co najmniej 800 000 dostępnych pikseli
  - b) funkcję rozmycia punktu „top hat” (FWHM) nie większą niż 1 piksel: umożliwia to optymalne rozdzielanie refleksów dla kryształów białek o dużych stałych sieciowych.
  - c) większy niż 30-bitowy zakres dynamiczny: do jednoczesnego pomiaru słabych i silnych danych na tym samym obrazie, co eliminuje potrzebę powtarzania pomiarów.
  - d) lokalną szybkość zliczania: większą niż 1 x 10<sup>6</sup> fotonów na sekundę na piksel.
  - e) opcję trybu pomiaru czasu odczytu krótszego niż 10 ns: w celu najefektywniejszego wsparcia trybu ciągłego gromadzenia danych „bez migawki” (zmniejsza zarówno szum, jak i całkowity czas gromadzenia danych).
  - f) możliwość odświeżania z częstotliwością powyżej 50 Hz (dostosowanie do najsilniej rozpraszających kryształów)
  - g) możliwość rozróżniania energii (wykluczenie efektów fluorescencji rentgenowskiej)
  - h) wydajność kwantową wynoszącą co najmniej 98% przy długości fali promieniowania rentgenowskiego Cu(K<sub>α</sub>).
  - i) brak efektu smug, rozkwitu lub poświaty

#### **V. Wymagania goniometru:**

1. w celu osiągnięcia optymalnych warunków pomiaru aparat powinien posiadać goniometr czterokołowy o geometrii kappa.
2. goniometr musi być skonstruowany w taki sposób, aby osie obrotu wszystkich czterech kół przecinały się w jednym punkcie z błędem nie większym niż 10 μm,

- również wtedy gdy detektor znajduje się w najmniejszej, jak i największej odległości od środka kryształu. Konstrukcja goniometru musi umożliwiać rekaliibrację dyfraktometru na miejscu bez konieczności przewozu do producenta.
3. wózek detektora lub ramię Theta musi być zintegrowany z systemem w taki sposób, aby odległość od środka próbki do powierzchni detektora była zmienna i podlegała kontroli komputerowej, z dużą dokładnością, w zakresie co najmniej 38 - 200 mm.
  4. czterokołowy goniometr kappa musi wytrzymywać obciążenie co najmniej 2,0 kg na oś phi.
  5. goniometr musi umożliwiać uzyskanie prędkości skanowania wynoszącej co najmniej 10 st./s na osi Omega i 20 st./s na osi Phi.
  6. goniometr musi być wyposażony w kolorowy mikroskop z kamerą wideo: w celu ułatwienia centrowania próbki kryształu „na żywo”, a także indeksowania ścian kryształów w celu korekty absorpcji promieniowania rentgenowskiego przez kryształ.
  7. goniometr musi być wyposażony w funkcję detekcji kolizji (ochrona programowa i sprzętowa) oraz zintegrowany system blokowania ruchu goniometru w przypadku kolizji.
  8. musi być możliwa automatyczna kalibracja modelu przyrządu przy użyciu dostarczonego stabilnego kryształu testowego
  9. konieczne jest, aby konstrukcja goniometru umożliwiała ponowną kalibrację na miejscu, jeśli będzie to kiedykolwiek konieczne (bez konieczności wysyłki do fabryki)

#### **VI. Wymagania dotyczące komputera i oprogramowania:**

1. dyfraktometr musi być wyposażony w wydajny komputer sterujący z całym oprogramowaniem wymaganym do sterowania przyrządem, gromadzenia danych, integracji i analizy danych itp. Ponadto dodatkowy komputer do wykonywania pełnych obliczeń krystalograficznych
2. należy dostarczyć nieograniczoną liczbę licencji rozumianą jako nieograniczoną liczbę dostępów na oprogramowanie do integracji i analizy danych, a licencje na oprogramowanie muszą być ważne przez czas nieograniczony. Wszyscy użytkownicy muszą mieć możliwość analizowania danych na ich własnych komputerach PC
3. oprogramowanie musi być łatwe w obsłudze oraz musi zawierać szybkie narzędzie do gromadzenia danych / badanie przesiewowe kryształu itp. Musi umożliwiać wykonanie kolejnego bardziej obszernego automatycznego „eksperymentu wstępnego” w celu najskuteczniejszego określania komórki elementarnej i oceny jakości kryształów (granica rozdzielczości i mozaikowatość itp.). Korzystając z tych wstępnych danych, oprogramowanie musi w pełni automatycznie i szybko optymalizować strategię gromadzenia danych - zgodnie z kryteriami wprowadzanymi przez użytkownika (na przykład wymaganą rozdzielczością, redundancją, średnią  $I / \sigma$  lub całkowitym czasem gromadzenia danych itp.)
4. sprzęt i oprogramowania dyfraktometru musi posiadać możliwość rejestracji i analizy danych dyfrakcyjnych próbek polikrystalicznych („mikro-dyfrakcji” metodą skanowania Gandolfi).
5. oprogramowanie musi obejmować możliwość sprawdzania zmierzonych parametrów komórki elementarnej w stosunku do istniejących strukturalnych baz danych, takich jak CCDC, a także bibliotek komórek „lokalnych” (Uniwersytet Wrocławski)
6. oprogramowanie musi posiadać narzędzia programowe do półautomatycznego przetwarzania obrazów pochodzących z kryształów zbliżniaczonych, kryształów modulowanych ( w tym niewspółmiernie), kwazikryształów i do analizy rozpraszania dyfuzyjnego
7. oprogramowanie do w pełni zautomatyzowanego rozwiązania i udokładniania struktur krystalicznych jednocześnie z bieżącym gromadzeniem danych. Pakiet

- oprogramowania i udokładniania struktury powinien obejmować metody bezpośrednie, metody Pattersona i metody dual space
8. aparat musi mieć możliwość zdalnego sterowania przez internet - za pomocą odpowiedniego programu „zdalnego pulpitu” lub innego podobnego oprogramowania
  9. oprogramowanie musi mieć opcję zapisywania obrazów w formacie, który jest kompatybilny z innymi alternatywnymi programami do przetwarzania danych, bez dalszej konwersji
  10. w celu przetwarzania danych zebranych przy użyciu urządzeń synchrotronowych i innej aparatury, oprogramowanie do analizy danych musi mieć możliwość wczytywania (a także wysyłania) obrazów w różnych formatach „obcych”
  11. musi być zapewnione bezpłatne, bezterminowe i regularne (co najmniej raz w roku) uaktualnianie oprogramowania do podstawowego sterowania przyrządami, gromadzenia i analizy danych

**VII. Wymagania dotyczące przystawki temperaturowej:**

1. system musi zawierać urządzenie (na bazie ciekłego azotu) do kontroli temperatury kryształu w zakresie 80 - 500 K
2. przystawka temperaturowa powinna posiadać wszelkie niezbędne sterowniki, 60 litrowy zbiornik na ciekły azot, wszystkie niezbędne połączenia itp.
3. musi być w pełni zgodna ze sprzętem i oprogramowaniem dyfraktometru oraz jej obsługa musi być dostępna z menu oprogramowania do zbierania danych krystalograficznych.

**VIII. Wymagania dotyczące sprzętu chłodzącego:**

W ramach oferty musi być uwzględniony recyrkulacyjny agregat chłodniczy lub inny sprzęt niezbędny do chłodzenia dyfraktometru rentgenowskiego i związanego z nim wyposażenia

**IX. Inne:**

1. w ramach oferty zapewniona musi być dostawa, montaż i instalacja oraz uruchomienie dyfraktometru monokrystalicznego wraz z przeszkoleniem pracowników Wydziału Chemii w zakresie obsługi
2. wykonawca zapewnia dostępność urządzenia dla osób niepełnosprawnych