

仕 様 書

機 器 名：全自動多目的X線回折装置（9kW-Mo、DSC付）

数 量：一式

納入場所：地方独立行政法人京都市産業技術研究所 2階 X線機器分析室
（京都市下京区中堂寺栗田町9-1 京都リサーチパーク9号館南棟）

納入期限：令和9年3月31日（水）

1 機器の概要

全自動多目的X線回折装置（9kW-Mo、DSC付）は、DSCによる熱的変化とXRDの結晶状態変化を同時に測定する装置である。これにより、多形転移、脱水、結晶化、凝固などの相転移に伴う結晶材料の変化を連続的にモニターすることができる。また、波長の短いMo（モリブデン）線源、二次元検出器での測定により、短時間で多くの回折情報を取得できるだけでなく、二体分布関数（PDF／Pair Distribution Function）解析が可能であり、物質の結晶性に依らず原子間距離と配位数の情報を散乱パターンから導出できる。

2 機器の構成

- （1）X線発生部
- （2）X線光学系部
- （3）ゴニオメータ部
- （4）試料台部
- （5）検出器部
- （6）X線DSC部
- （7）温調ユニット部
- （8）微小領域測定部
- （9）制御・解析部

3 必要とする規格及び性能条件

（1）X線発生部

- | | |
|-----------|--|
| ア X線発生方式 | : 回転対陰極方式であること。 |
| イ 最大定格出力 | : 9kW以上であること。 |
| ウ ターゲット | : 銅（Cu）及びモリブデン（Mo）の2種類を付属すること。 |
| エ 管電圧、管電流 | : 管電圧は20kV～60KVで、1kVステップで制御できること。管電流は10mA～200mAで、1mAステップで制御できること。また、管電圧、管電流の安定度は電源変動±10%以内において±0.01%以内であること。 |

- オ 保安機構 : 冷却水の水量、水圧及び水温異常の検出機能、X線発生部の過負荷異常の検出機能、最高及び最低管電圧の出力異常の検出機能、緊急停止スイッチ、漏電ブレーカーを有すること。
- カ 防X線カバー : インターロック機構付開閉扉方式であること。
- キ 漏洩X線量 : 防X線カバーの外側10cmの距離で1cm線量当量率は $1.0 \mu\text{Sv/h}$ 以下であること。
- ク X線発生の警告 : X線発生中を示す警告灯を有していること。
- ケ 冷却機構 : 冷却能力9kW以上の空冷分離型の循環送水装置を付属すること。

(2) X線光学系部

- ア 入射スリット : 入射スリットBOXの幅範囲は0.05mm～11mmであり、最小ステップ0.001mmで制御できること。
- イ 受光スリット : 受光スリットBOXの幅範囲は0.03mm～20mmであり、最小ステップ0.001mmで制御できること。
- ウ 入射ソーラースリット : 入射ソーラースリットは 2.5° であること。
- エ 受光ソーラースリット : 受光ソーラースリットは 2.5° であること。
- オ 光学系 : 放物面多層膜ミラーを用いた平行ビーム光学系を有し、集中法への切り替えは放物面多層膜ミラーを取り外すことなく、スリットの差し替えで変更可能であること。また、Cu波長及びMo波長に対応した放物面多層膜ミラー2種類を付属すること。
- カ 集光ミラー : Mo波長に対応した集光ミラーを付属すること。

(3) ゴニオメータ部

- ア ゴニオメータ方式 : 試料水平型の $\theta-\theta$ 式ゴニオメータであること。また、駆動方式は主軸直結エンコーダによるフルクローズ制御方式であること。
- イ 2θ 軸最小ステップ幅 : 2θ 軸の最小ステップ幅は 0.0001° 以下であること。
- ウ ゴニオメータ半径 : ゴニオメータ半径は300mm以上であること。
- エ 測定角度範囲 : 測定角度範囲は $-10^\circ \sim 160^\circ$ (2θ 換算値)以上の範囲であること。

(4) 試料台部

- ア 試料台移動範囲 : 試料台上下移動範囲は $-10\text{mm} \sim 2\text{mm}$ で最小ステップは 0.00002mm 以下であること。
- イ 試料台 : 4インチ試料台を付属し、スペーサーを入れ替えることにより最大21mm厚以上の試料測定ができること。また、回転速度が $0.1 \sim 120\text{rpm}$ のキャピラリー回転試料台を付属すること。

(5) 検出器部

- ア 検出器 : 直接検出型フォトンカウンティング2次元検出器であり、0次元、1次元、2次元測定の実行ができること。また、ピクセルサイズは $100\mu\text{m} \times 100\mu\text{m}$ 以下、検出面積は $77.5\text{mm} \times 38.5\text{mm}$ 以上であること。
- イ 計数直線性 : 計数直線性は $1 \times 10^6\text{cps/pixel}$ 以上であること。
- ウ 対応波長、検出効率 : Cu波長及びMo波長に対応していること。検出効率はCuK α 線に対して99%、MoK α 線に対して60%以上を有すること。
- (6) X線DSC部
- ア X線DSC装置 : X線回折と示差走査熱量 (DSC) の同時測定ができること。水蒸気発生装置、チラー、温度コントローラを付属すること。
- イ 温度範囲 : 測定温度範囲は室温 $\sim 350^\circ\text{C}$ であること。
- ウ 測定雰囲気 : 測定雰囲気は大気及び窒素フローであること。また、水蒸気発生装置と組み合わせて加湿雰囲気での測定ができること。
- エ 冷却方式 : 冷却方式は水冷式であること。
- (7) 温調ユニット部
- ア 高温装置 : ホットプレートを搭載したドーム型の高温装置及び温度コントローラを付属すること。
- イ 温度範囲 : 測定温度範囲は室温 $\sim 1100^\circ\text{C}$ であること。
- ウ 測定雰囲気 : 測定雰囲気は大気、窒素フロー、真空であること。
- エ 冷却方式 : 冷却方式は圧縮空気冷却方式であること。
- (8) 微小領域測定部
- ア XYステージ : X、Y方向に最大 $\pm 10\text{mm}$ 以上移動可能なステージを有し、各軸の最小ステップはX軸 0.0005mm 、Y軸 0.0005mm 以下であること。
- イ 試料観察カメラ : X線照射位置を決定するための試料観察カメラを有し、微小領域のマッピング測定が可能であること。
- ウ コリメータ : コリメータ3種を付属すること。
- (9) 制御・解析部
- ア ハードウェア
- (ア) CPU : CPUはIntel社製Core i7相当品であること。
- (イ) OS : OSはMicrosoft社製Windows11Pro (64bit) 相当品であること。
- (ウ) メモリ : メモリは32GB以上であること。
- (エ) 記憶媒体 : 記憶媒体はSSD (512GB以上) とHDD (1TB以上) であること。
- (オ) 光学ドライブ : 光学ドライブはDVDライターであること。
- (カ) ディスプレイ : 対角23.8インチ以上のカラー液晶ディスプレイであること。

(キ) その他付属品 : JIS準拠の日本語版キーボード、光学式マウス、パソコンラック、イスを付属していること。

イ ソフトウェア

(ア) 本体制御機能 : X線発生装置、光学系、ゴニオメータ、検出器の制御機能を有していること。また、X線光学系の自動調整機能を有し、調整結果を光学系とアタッチメントごとに保存できること。

(イ) 言語 : 日本語及び英語の表示及び印刷言語の切り替え機能を有していること。

(ウ) ガイド機能 : 測定目的に応じて、光学素子の構成チェック、光学系調整、試料位置調整の後、適切な条件で測定を行うガイド機能を有していること。

(エ) 解析機能 : 解析ソフトウェアは、バックグラウンド除去、スムージング、ピークサーチ、 $K\alpha 2$ 除去、定性分析、格子定数の精密化、結晶化度、結晶子サイズ・格子歪、リートベルト解析、DSC解析、全散乱解析(PDF解析)、構造推定の機能を有していること。

(オ) その他ライセンス : X線データベースとしてICDD PDF-2(ライセンス期間10年)を1ライセンス付属していること。また、Microsoft Officeを1ライセンス付属していること。

4 契約条件

(1) 保証期間・研修等

ア 搬入、設置及び調整等に係る費用は、全額納品者の負担とする。

イ 搬入時は、当所内の床、壁等の破損を防ぐこと。必要に応じて養生等を行うこと。

当所の建物、設備などに損傷を与えた場合は、納品者の責任において、原状に復すること。

ウ 本設備が正常に作動するように検収後5年間は無償で点検・調整を行うこと。

エ 検収後1年間は、通常の使用により故障した場合の無償保証に応じること。

オ 検収は設置場所で職員立会いの下で行うこと。

カ 本機器の操作等に関する関係職員に対する研修内容、方法、期間等については納品者と協議のうえ決定するものとする。

(2) 補償等

ア 設置後に仕様書に違反していることが判明した場合には、速やかに対応することとし、違反が修正できない場合は契約完了後でもこれを解除する。

イ 設置・撤収・建造物回復などに要する費用は全て納品者が負担するものとし、地方独立行政法人京都市産業技術研究所への補償については別途協議して決定するものとする。

5 参考機種

株式会社リガク SmartLab9kWと同等品若しくはそれ以上。