

微小部X線結晶構造解析装置 仕様書

令和4年5月

地方独立行政法人大阪産業技術研究所

森之宮センター

1. 調達の背景及び目的

単結晶構造解析は、分子構造や、結晶中での分子配列を直接可視化できる強力な分析方法である。しかし、測定法の進展が早いことや、測定に関して多くのノウハウを要することから、産業界では利用例が少なく、また公的研究機関にもほとんど導入されてこなかった。近年、有機エレクトロニクス材料を中心に固体結晶性材料の開発が活発化しており、単結晶構造解析のニーズも増加している。

大阪産業技術研究所は、当該装置を現有している全国唯一の公設試であり、化学メーカーの集積地である大阪地域において単結晶構造解析を活用した企業支援に取り組んできた。今回導入を図る機器ではマイクロフォーカスX線源が搭載されているため、X線強度が向上し、実効焦点が小さくなる。これにより、測定時間が大幅に短縮され、測定可能な結晶サイズも微小化できる。

2. 調達物品の名称、数量及び構成内訳

名称： 微小部X線結晶構造解析装置

数量： 1 式

内訳： 1. 微小部X線結晶構造解析装置本体（付属品含む） 1 式
2. 吹付式温度可変装置 1 式
3. システム制御およびデータ解析装置 1 式
4. サンプリング用顕微鏡 1 式

3. 機器の性能、機能、規格等

3-1. 微小部X線結晶構造解析装置本体（付属品含む） 1 式

微小部X線結晶構造解析装置は、微小な単結晶のX線回折を測定し、その分子構造、結晶構造、絶対構造を決定する装置であり、以下の要件を満たすこと。

3-1-1. X線発生部

- A Cu 管球と Mo 管球のデュアルX線源を備え、測定用ソフトウェアで切り替え可能なこと
- B 管球の最大負荷は Cu 管球、Mo 管球とも 50 W 以上であること
- C X線管球の焦点サイズは Cu、Mo とも $\phi 50 \mu\text{m}$ 以下であること
- D 管球の冷却が水冷式であること

3-1-2. 光学系部

- A マイクロフォーカスX線源を使用していること
- B 集光ミラーの調整機構が自動化されていること
- C 発散角を最適化する入射スリットを付属すること
- D スリットの有無は測定用ソフトウェアから変更できること
- E 試料－検出器間の距離が少なくとも 31 mm～180 mm の範囲で調整可能であり、最適距離の判定と設定が自動化されていること

3-1-3. ゴニオメータ部

- A κ 型のゴニオメータであること
- B ゴニオメーターヘッドは IUCr 規格（49 mm タイプ）であること

- 3-1-4. 試料観察部
 - A 試料観察用のカメラを備えていること
 - B 試料観察用のモニタを防X線カバー内に備えていること
- 3-1-5. 検出器
 - A 直接検出型のハイブリッド光子計数型検出器（HPC）を有していること
 - B 検出器のピクセルサイズが $100 \times 100 \mu\text{m}$ 以下であること
 - C 検出器の画素数は 55 万以上であること
 - D 検出器の計数能力は 1 ピクセルあたり毎秒 1×10^6 カウント以上であること
 - E シャッターレス測定が可能であること
- 3-1-6. 付属品
 - A 標準試料としてシチジン結晶を付属すること
- 3-2. 吹付式温度可変装置 1 式
 - A 100 K 以下の低温測定が可能であること
 - B 窒素製造装置を備えていること
 - C 測定用ソフトウェアとの連携により、測定と連動した温度制御が可能であること
- 3-3. システム制御およびデータ解析装置 1 式
 - 3-3-1. 制御用 PC 本体および周辺機器
 - A メモリは 16 GB 以上、ハードディスク物理容量は 2 TB 以上を備えていること
 - B 液晶カラーモニタ、マウス、キーボードを備えていること
 - 3-3-2. データ解析用ノート PC
 - A CPU は 3 GHz、6 コア相当以上の処理速度を有すること
 - B メモリは 8 GB 以上、ハードディスク物理容量は 256 GB 以上を有していること
 - C グラフィックボードは VRAM 4 GB 以上の専用 GPU、DirectX 11 (Direct3D 11 以上) を満たすこと
 - 3-3-3. 測定・解析ソフトウェア
 - A 制御用 PC には、測定用ソフトウェアと解析用ソフトウェアを搭載すること
 - B X線発生装置、ゴニオメータ、検出器、吹付式温度可変装置の制御ができること
 - C 自動測定が可能であること
 - D 粉末X線回折測定ができるソフトウェアを備えていること
 - E 粉末X線回折測定データは 2 次元および 1 次元表示ができること
- 3-4. サンプリング用顕微鏡 1 式
 - A アポクロマート補正機能を備えたグリノー式双眼実体顕微鏡であること
 - B 最大総合倍率が 55 倍以上であること
 - C 標準組合せ時の作動距離が 120 mm 以上であること
 - D 透過光照明が使用できること

4. 設置場所

大阪府大阪市城東区森之宮 1 丁目 6 番 5 0 号

5. 納入期限

令和5年3月31日（金）

6. 検査

検査項目は以下の通りとする。

- ・員数検査
- ・外観検査
- ・性能検査

なお、検査用の試料及び消耗品は受注者が用意すること。

7. 職員研修

本システムについて取り扱い方法などに関する研修を当研究所職員に対して行うこと。

なお、研修用の資料、必要な試料および消耗品等は、受注者が用意すること。

8. その他

- 8-1. 装置の搬入、設置または据え付け、調整、研修および検収に要する諸費用は受注者の負担とし、受注者が所定の納入期限までに速やかに行うこと。
- 8-2. 装置の搬入、設置または据え付け、付帯工事、接続作業および調整等を行うにあたっては、事前に担当者と十分協議すること。引掛埋込コンセント等の設備は当研究所指定の型番を使用すること。また、これらの実施にあたっては、当研究所の業務に支障をきたさないよう十分に配慮すると共に、万一、業務や建物設備等に損害が生じた場合は、受注者の責任において、これを補償すること。
- 8-3. 装置の操作方法に対して疑義が生じた場合には、日本国内にサービス拠点を有し、技術員による派遣指導、教育、技術的相談またはその他の適切な方法によって速やかに応じられる体制が整えられていること。
- 8-4. 装置納入後1年を装置の保証期間とし、正常な使用状況において発生した故障については、速やかに無償にて修理または交換すること。
- 8-5. 装置納入後1年経過後の有償期間においても、故障が発生した場合は、速やかに故障部品の納入や補修を行うなどの措置を講じ、当研究所の業務に支障をきたさないようにすること。
- 8-6. 当該装置が製造中止になったとしても、製造中止後7年間は装置の性能維持に必要な部品の供給を確保すること。
- 8-7. 装置の性能維持に必要な部品を供給することができる工場を有し、速やかな部品供給を行うことができる体制であること。
- 8-8. 装置の説明、使用方法、点検方法、トラブル時の対処方法などを記した日本語のマニュアルを1部提出すること。

- 8-9. 機械に関する危険性等の通知について規定している改正労働安全衛生規則第 24 条の 13 に基づき「残留リスク一覧」を提出すること。
- 8-10. パソコンにプレインストールされているソフトウェアに対しては、必要なライセンス認証を行い、プロダクトキーが記載されたパッケージ部材等、ライセンスを証明できるものを付属すること。
- 8-11. 本仕様書に定める以外の項目で疑義が生じた場合は、双方協議のうえに対応すること。

以上