

MEMORIA JUSTIFICATIVA

Adquisición de un Microscopio de Barrido (STM/nc-AFM) de Baja Temperatura y Ultra Alto Vacío con Campo Magnético y Recolección de Luz

PROYECTO ERC MAGNESIS

1. INTRODUCCIÓN Y ANTECEDENTES

La Fundación IMDEA Nanociencia es un centro de investigación de referencia en el ámbito de la nanociencia y la nanotecnología en España. Su actividad científica se centra en la exploración y manipulación de la materia a escala atómica y molecular, abarcando áreas como la física de superficies, la química molecular sobre superficies, la plasmónica, la espintrónica y la nanofotónica. Estas líneas de investigación requieren instrumentación de vanguardia capaz de caracterizar materiales y fenómenos con resolución atómica y bajo condiciones controladas de temperatura, vacío y campo magnético.

En este contexto, la microscopía de efecto túnel (STM) y la microscopía de fuerza atómica en modo no contacto (nc-AFM) constituyen herramientas esenciales para la investigación fundamental y aplicada en nanociencia. Estas técnicas permiten obtener imágenes con resolución atómica, realizar espectroscopías locales, manipular átomos y moléculas individuales, y estudiar propiedades electrónicas, magnéticas y ópticas a escala nanométrica.

La presente memoria tiene por objeto justificar la necesidad de adquirir un microscopio de barrido STM/nc-AFM de baja temperatura y ultra alto vacío, dotado de campo magnético y capacidad de iluminación y recolección de luz en la unión túnel, como equipamiento científico imprescindible para el desarrollo de las líneas de investigación actuales y futuras del centro.

1.1 Marco de financiación: Proyecto ERC Synergy MAGNESIS

La adquisición del equipo objeto de esta memoria se enmarca en el proyecto MAGNESIS (ERC 101224406-MAGNESIS), financiado por la Unión Europea a través de la convocatoria ERC Synergy Grants 2025 del Consejo Europeo de Investigación (European Research Council). Las ERC Synergy Grants están diseñadas para respaldar iniciativas científicas ambiciosas que solo pueden alcanzarse mediante la colaboración de varios equipos de investigación punteros, con el fin de impulsar las fronteras del conocimiento científico.

MAGNESIS tiene como objetivo proporcionar una base científica sólida para comprender cómo los campos magnéticos pueden influir de manera significativa en las reacciones electrocatalíticas, un hallazgo reciente que abre nuevas oportunidades para mejorar la eficiencia y selectividad de tecnologías clave para una industria sostenible y libre de combustibles fósiles. El proyecto se centra en dos reacciones fundamentales: la oxidación del agua (OER) y la reducción del dióxido de carbono (CO₂RR), ambas potencialmente sensibles a efectos de espín.

El consorcio MAGNESIS reúne a cuatro grupos de investigación líderes en catálisis, ciencia de superficies, magnetismo y modelización teórica: el Prof. José Ramón Galán-Mascarós, del Institut Català d'Investigació Química (ICIQ), como coordinador del proyecto; el Prof. David Écija, de IMDEA Nanociencia, responsable de aportar las capacidades de ciencia de superficies a escala atómica en condiciones de ultra alto vacío; el Prof. Karsten Reuter, del Fritz Haber Institute de la Max Planck Society, a cargo de la modelización computacional; y el Prof. Jeppe V. Lauritsen encargado de la caracterización de superficies in operando, de la Universidad de Aarhus. El proyecto tiene una duración de seis años y se organiza en cuatro paquetes de trabajo que abarcan desde el estudio de sistemas modelo para OER y CO₂RR, pasando por el desarrollo teórico de la magneto-electrocatalisis, hasta la validación experimental en dispositivos electroquímicos mejorados con impacto en la transición energética.

Dentro de este marco, la contribución de IMDEA Nanociencia consiste en investigar los mecanismos de la magneto-electrocatalisis a la escala espacial última, empleando técnicas de ciencia de superficies con resolución atómica. El microscopio STM/nc-AFM objeto de esta adquisición constituye la herramienta central e imprescindible para llevar a cabo dicha investigación, ya que permite combinar la obtención de imágenes y espectroscopías a escala atómica con la aplicación simultánea de campo magnético, el acceso óptico a la unión túnel y la preparación de muestras modelo en condiciones de ultra alto vacío.

2. JUSTIFICACIÓN DE LA NECESIDAD

2.1 Necesidades científicas y técnicas

Las líneas de investigación de IMDEA Nanociencia exigen la capacidad de estudiar sistemas atómicos y moleculares bajo condiciones extremas y simultáneas: temperaturas criogénicas (por debajo de 5 K), ultra alto vacío (presiones inferiores a 3×10^{-10} mbar), campo magnético y acceso óptico a la unión túnel. La combinación de estas capacidades en un único instrumento resulta esencial para abordar los siguientes objetivos científicos:

- Caracterización estructural y electrónica con resolución atómica de superficies metálicas y semiconductoras, moléculas individuales y nanoestructuras autoensambladas, empleando técnicas de STM y nc-AFM con sensor QPlus.
- Espectroscopía de modulación a escala local, incluyendo medidas de conductancia diferencial (dI/dV), espectroscopía inelástica (d^2I/dV^2), espectroscopía de desplazamiento de frecuencia (Δf) y curvas fuerza-distancia, fundamentales para determinar propiedades electrónicas y vibracionales de sistemas nanométricos.
- Manipulación controlada de átomos y moléculas individuales sobre superficies, técnica que requiere estabilidad térmica y mecánica extrema, así como una deriva espacial inferior a 0,2 nm/h.
- Investigación en nanofotónica y luminiscencia de la unión túnel, mediante la integración de dos elementos ópticos (espejos parabólicos) que permita acoplar luz desde y hacia la unión túnel. Esta capacidad abre la posibilidad de realizar experimentos de luminiscencia inducida por efecto túnel (STL), espectroscopía Raman de punta mejorada (TERS) y estudios de plasmónica a escala atómica.

- Estudio de propiedades magnéticas a escala atómica mediante la aplicación de un campo magnético estático de al menos 0,5 T en la posición de la muestra, permitiendo investigar fenómenos de espintrónica, anisotropía magnética molecular y excitaciones de espín individuales. Además el cableado de radiofrecuencia permitirá desarrollar la moderna técnica de electronic paramagnetic resonance a escala atómica (EPR-STM)

- Preparación completa de muestras in situ, incluyendo ciclos de bombardeo iónico y calentamiento a temperaturas de hasta 1700 K, deposición de moléculas y metales, dosificación de gases (Ar, CO, H₂) y análisis de gases residuales, todo ello sin ruptura de vacío, lo que garantiza superficies de máxima pureza.

2.2 Insuficiencia de los medios actuales

Actualmente, el centro no dispone de un instrumento que integre de forma simultánea todas las capacidades requeridas: microscopía STM y nc-AFM con resolución atómica, operación a baja temperatura (< 5 K), campo magnético, acceso óptico a la unión túnel, líneas de radiofrecuencia y un sistema completo de preparación de muestras con múltiples evaporadores. La adquisición de equipos separados para cubrir cada una de estas funcionalidades resultaría económicamente inviable y técnicamente ineficiente, al requerir transferencias de muestras entre distintos sistemas con la consiguiente pérdida de condiciones experimentales y contaminación de superficies.

Por tanto, la adquisición de un sistema integrado que combine todas estas funcionalidades constituye la solución óptima tanto desde el punto de vista científico como económico.

2.3 Impacto en la actividad investigadora

La incorporación de este equipo permitirá a IMDEA Nanociencia situarse a la vanguardia internacional en el campo de la nanociencia experimental, dotando al centro de una herramienta con capacidades únicas en el ámbito nacional e internacional. El equipo habilitará nuevas líneas de investigación en química sobre superficies, espintrónica a escala atómica y nanofotónica de la unión túnel, bajo condiciones criogénicas, fortaleciendo la competitividad del centro para la obtención de proyectos de investigación nacionales y europeos, la atracción de talento investigador y la producción científica de alto impacto.

3. DESCRIPCIÓN GENERAL DEL EQUIPO A ADQUIRIR

El equipo objeto de la presente contratación consiste en un sistema completo de ultra-alto vacío que incluye los siguientes componentes:

3.1 Microscopio de barrido de baja temperatura y ultra alto vacío

El microscopio estará montado sobre un criostato de helio líquido apantallado con nitrógeno líquido, permitiendo la operación a temperaturas inferiores a 5 K con intervalos de rellenado superiores a 48 horas y un consumo de helio inferior a 2 litros cada 24 horas. El sistema de detección estará basado en la técnica QPlus tuning fork para nc-AFM, con capacidad de medida simultánea de corriente túnel. El rango de barrido a 5 K será igual o superior a 1,1 μm $\times$ 1,1 μm $\times$ 0,2 μm , con una deriva espacial inferior a 0,2 nm/h. La cabeza del microscopio estará equipada con dos elementos ópticos, en concreto espejos parabólicos con apertura numérica aproximada de 0,4, capaz de acoplar luz desde y hacia la unión túnel al sistema óptico externo, montado sobre un sistema de posicionamiento

tridimensional. El microscopio se suministrará cableado con dos líneas de radiofrecuencia: una conectada al portamuestras y otra terminada en las proximidades de la punta, actuando como antena. Se aplicará un campo magnético estático de al menos 0,5 T a la muestra.

3.2 Campana de ultra alto vacío del microscopio

El microscopio se alojará en una cámara de ultra alto vacío con presión base de hasta 3×10^{-10} mbar, equipada con parking para muestras y puntas, varilla de manipulación (wobble stick), sistema de deposición molecular con línea de visión directa a la unión túnel, válvula de fuga para CO, mirillas de inspección, manómetro de ionización Bayard-Alpert y sistema de bombeo libre de vibraciones basado en bomba iónica, con posibilidad de sublimación de titanio.

3.3 Electrónica de control

Se incluirá una electrónica de control completa con ordenador, monitores, amplificador lock-in dual phase, PLL digital, módulo de demodulación compatible con sensores QPlus (18-150 kHz), capacidad de operación en múltiples modos (corriente constante, desplazamiento de frecuencia constante, altura constante, multipass), control de espectroscopías (I(V), dI/dV, $\Delta f(Z)$, etc.), manipulación atómica, atom tracking con compensación de deriva, entradas y salidas analógicas y digitales (TTL), programación remota mediante Python y herramientas de automatización mediante scripting determinista.

3.4 Campana de preparación con sistema de introducción rápida

Se incluirá una cámara de preparación de ultra alto vacío completamente equipada con: cañón de iones de Ar^+ (0,4-2,5 keV), manipulador multiteje con calentamiento hasta 1700 K y enfriamiento hasta 110 K, sitio para calentamiento por corriente directa para semiconductores, brida DN160CF compatible con el sistema LEED BDL800IR-MCP de OCI, compatibilidad con espectrómetro de masas cuadrupolar Hiden existente, evaporador molecular de tres celdas con cambio de crisoles sin ruptura de vacío, evaporador por haz de electrones de múltiples fuentes, crackeador de hidrógeno, analizador de masas de gas residual, microbalanza de cristal de cuarzo, válvulas de dosificación de gases y sistema de bombeo completo con bomba turbomolecular de alta compresión para H_2 , bomba iónica y TSP/NEG. Se incluirá una cámara de carga rápida (load-lock) para introducción y retirada de muestras sin ruptura de vacío.

3.5 Marco, sistema antivibratorio y grúa

El sistema se montará sobre un bastidor con aislamiento activo de vibraciones basado en actuadores piezoeléctricos, con sistema de izado para mantenimiento, racks para electrónicas y protección ante fallos eléctricos.

3.6 Accesorios

Se incluirán, entre otros: caña de transferencia de helio, pirómetro (200-1500 °C), sistema de horneado con controlador programable, herramienta de preparación de puntas (tip etcher), hilo de tungsteno, fuentes de iluminación, cámara CCD/CMOS para monitorización de la aproximación de punta, sensor de nivel de helio con unidad de lectura, lectora de temperatura, puntas STM y sensores QPlus listos para uso, diversos portamuestras compatibles (dobles metal/metal, semiconductor/metal, tipo

sample flag y portamuestras con contactos eléctricos adicionales), unidades de transporte, crisoles para evaporador molecular y monocristales de Au(111) y Si(111) para pruebas de aceptación.

3.7 Instalación, formación y pruebas

El suministro incluirá el transporte, instalación completa in situ, formación técnica al personal del centro, pruebas de aceptación en fábrica (FAT) y pruebas de aceptación en las instalaciones (SAT). La garantía del equipamiento será de un mínimo de dos años.

4. IDONEIDAD E INEXISTENCIA DE MEDIOS PROPIOS SUFICIENTES

Se certifica que la Fundación IMDEA Nanociencia no dispone actualmente de un equipo con las características técnicas descritas, ni resulta posible obtener dichas prestaciones mediante la combinación o adaptación de los instrumentos existentes en el centro. El carácter altamente especializado y la complejidad técnica del equipo hacen inviable su fabricación o desarrollo interno, siendo imprescindible recurrir a la adquisición a un fabricante especializado del mercado.

La combinación simultánea de microscopía STM y nc-AFM con resolución atómica, operación a temperaturas inferiores a 5 K, campo magnético, acceso óptico a la unión túnel, líneas de radiofrecuencia y un sistema completo de preparación de muestras constituye un conjunto de requisitos que solo puede satisfacerse mediante un sistema integrado diseñado y fabricado a medida por un proveedor especializado.

5. ESTIMACIÓN PRESUPUESTARIA

Tras la realización de un estudio de mercado y el análisis de ofertas de fabricantes especializados en instrumentación de microscopía de barrido de ultra alto vacío y baja temperatura, se estima que el valor de la base imponible del suministro objeto de esta memoria asciende a un millón cien mil euros (1.100.000,00 €), IVA no incluido.

Dicho importe comprende la totalidad de los componentes descritos en el apartado 3 de esta memoria, incluyendo el microscopio STM/nc-AFM con criostato de helio líquido, las cámaras de ultra alto vacío (STM y preparación), la electrónica de control completa, el sistema de introducción rápida (load-lock), el bastidor con aislamiento activo de vibraciones, todos los accesorios y consumibles iniciales, así como los servicios de transporte, instalación, formación técnica y pruebas de aceptación en fábrica (FAT) y en las instalaciones del centro (SAT).

La estimación presupuestaria se ha elaborado conforme a las condiciones actuales del mercado y podrá ser actualizada en el momento de la licitación en función de las ofertas recibidas.

6. CONDICIONES DE EJECUCIÓN Y PLAZO DE GARANTÍA

El contrato incluirá el suministro completo del equipo, su transporte hasta las instalaciones de IMDEA Nanociencia, la instalación, puesta en marcha, formación técnica del personal y la realización de las pruebas de aceptación en fábrica (FAT) y en las instalaciones del centro (SAT).

El equipamiento contará con una garantía mínima de dos (2) años a partir de la superación satisfactoria de las pruebas de aceptación en las instalaciones (SAT).

El calendario de pagos se estructurará del siguiente modo: un primer pago tras la aprobación de los planos técnicos y la recepción de los requisitos de laboratorio (electricidad, agua, gases, manómetros); un segundo pago tras la superación de las pruebas de aceptación en fábrica (FAT); y el pago restante tras la superación de las pruebas de aceptación en las instalaciones (SAT).

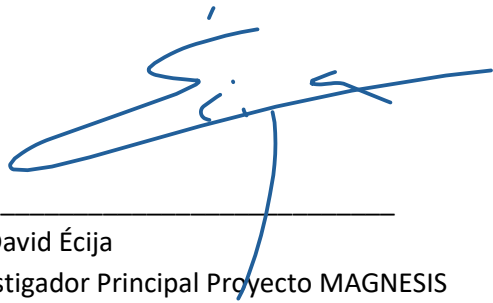
7. CONCLUSIÓN

Por todo lo expuesto, se considera plenamente justificada la necesidad de adquirir un microscopio de barrido (STM/nc-AFM) de baja temperatura y ultra alto vacío, con campo magnético integrado y capacidad de recolección de luz, junto con el sistema completo de preparación de muestras, electrónica de control, accesorios y servicios de instalación, formación y pruebas de aceptación descritos en esta memoria.

Este equipo resulta imprescindible para el mantenimiento y avance de las líneas de investigación de IMDEA Nanociencia en el ámbito de la nanociencia experimental, y su adquisición contribuirá de forma decisiva a la competitividad científica del centro a nivel nacional e internacional.

Finalmente, cabe destacar que la adquisición de este equipo constituye un requisito imprescindible para la ejecución del proyecto MAGNESIS (ERC 101224406-MAGNESIS), financiado mediante una ERC Synergy Grant. El objetivo central de MAGNESIS no se limita a comprender los efectos de los campos magnéticos sobre las reacciones electrocatalíticas, sino que aspira a validarlos experimentalmente mediante el desarrollo de dispositivos electroquímicos mejorados con impacto real en la transición energética, a través de la producción de combustibles y productos químicos renovables. Para ello, el consorcio combinará las fortalezas complementarias de sus cuatro grupos de investigación con el fin de generar nuevos principios en la ciencia magneto-electroquímica y acelerar su transferencia a tecnologías energéticas sostenibles.

El microscopio STM/nc-AFM objeto de esta memoria es la herramienta central que permitirá a IMDEA Nanociencia aportar la capacidad de ciencia de superficies a escala atómica bajo campo magnético que el proyecto MAGNESIS requiere, siendo por tanto su adquisición condición necesaria para el cumplimiento de los compromisos asumidos por el centro ante el Consejo Europeo de Investigación.

Fdo. 
 Dr. David Écija
 Investigador Principal Proyecto MAGNESIS