

DIPARTIMENTO DI CHIMICA



SAPIENZA
UNIVERSITÀ DI ROMA

IL DIRETTORE DEL DIPARTIMENTO

- VISTO lo Statuto di Ateneo emanato con D.R. n. 3689 del 29.10.2012, prot. n. 0068595 e ss. mm.;
- VISTO il nuovo Regolamento Tipo emanato con D.R. n. 2699/2019;
- CONSIDERATA la richiesta della Prof.ssa Francesca Leonelli responsabile scientifico dello strumento NMR DIPARTIMENTALE Bruker 400 MHz;
- SENTITA la necessità di redigere un Regolamento contenente indicazioni puntuali e precise circa l'utilizzo dello strumento per il personale interno ed esterno al Dipartimento;
- VISTA la delibera del Consiglio di Dipartimento del 21.02.2024 – Punto 09

DISPONE

l'adozione del Regolamento per l'utilizzo dello strumento NMR DIPARTIMENTALE Bruker 400 MHz.

La presente disposizione verrà pubblicata sulla pagina web del Dipartimento.

Roma, li 22.02.2024

IL DIRETTORE

Prof. Luciano Galantini

Firma autografa sostituita a mezzo
stampa ai sensi dell'art. 3, comma 2,
del D.Lgs. 39/93



Regolamento NMR Dipartimentale Bruker 400 MHz

Il servizio di Risonanza Magnetica Nucleare, Nuclear Magnetic Resonance - NMR, del Dipartimento di Chimica dell'Università di Roma La Sapienza dispone di uno spettrometro NMR Bruker Avance NEO 400 Nanobay per liquidi con magnete superconduttore (Ascend™) a schermatura attiva operante a 9,4 T (frequenza di risonanza del protone di 400 MHz), *probe* di misure specifiche (carbonio, idrogeno, fluoro, fosforo), autocampionatore da 24 posti per tubi da 5 mm, ed è equipaggiato con hardware e software per la realizzazione di esperimenti multidimensionali, omonucleari ed eteronucleari inversi anche grazie a un efficiente sistema di generazione di gradiente di campo magnetico.

La strumentazione è stata ammodernata su fondi Finanziamento ammodernamento infrastrutture tecnologiche e grandi attrezzature scientifiche (CUP: B84G21000050001) e Finanziamento Ultra-microscopies and integrated core facilities in biomedical advanced science - microbiomed Sapienza Research - Infrastructure (CUP: B87H23000330002) progetto ORIONE.

Responsabili

La responsabile scientifica dello strumento è Francesca Leonelli (francesca.leonelli@uniroma1.it) e la responsabile tecnica Raffaella Gianferri (raffaella.gianferri@uniroma1.it).



Accesso al servizio

Lo strumento è a disposizione di tutti i membri del Dipartimento di Chimica, del personale di ricerca Sapienza e di enti esterni all'Ateneo previo pagamento di una quota associativa (da versare a inizio anno solare) o dell'esecuzione del singolo spettro (vedi Quote per l'utilizzo dello strumento). Lo strumento è a disposizione anche di enti esterni all'Ateneo previa stipula di una convenzione/contratto conto terzi.

Le quote e i pagamenti acquisiti serviranno alla gestione ordinaria annuale dello strumento, in particolare alla copertura dei costi di acquisto dei fluidi criogenici e delle bombole di gas necessari al funzionamento, per il contratto di manutenzione e supporto nelle operazioni di *refill* dell'elio liquido.

L'accesso al laboratorio NMR (Edificio Cannizzaro CU014, stanza 065 L070) è regolamentato secondo le disposizioni Sapienza e in accordo con il sistema di Gestione per la Salute e Sicurezza sul Lavoro di Sapienza.

Il personale di ricerca presente nell'organigramma della sicurezza del Dipartimento di Chimica e degli altri Dipartimenti di Sapienza (docenti, assegniste/i di ricerca e dottorande/i) può essere autorizzato all'utilizzo dello strumento previa formazione specifica attestata da documentazione in corso di validità e registrazione dell'utilizzo tramite procedura interna (la documentazione deve essere archiviata nelle cartelle SSL del Dipartimento di Chimica). La formazione potrà essere richiesta dal docente o dal RADRL delle attività di ricerca dell'assegnista o dal tutor del progetto di dottorato di ricerca alla responsabile scientifica.



L'accesso alla strumentazione in orari e giorni di chiusura del Dipartimento deve essere autorizzata per iscritto dalla responsabile scientifica e dal Datore di Lavoro (direttore del Dipartimento di Chimica) secondo le procedure interne del Dipartimento.

L'autorizzazione all'accesso allo strumento senza attività diretta su di esso potrà essere richiesta alla responsabile tecnica, concordando le modalità e i tempi di esecuzione dell'esperimento.

Il personale esterno a Sapienza non può avere accesso diretto alla strumentazione, dovrà essere assistito da personale strutturato o dalla responsabile tecnica, i quali effettueranno personalmente gli esperimenti.

Tempo macchina

La strumentazione presenta un autocampionatore da 24 *slot*, che permette un utilizzo ottimale del tempo macchina. L'inserimento di un campione in coda per l'acquisizione può avvenire in tre modi:

1. “coda giornaliera” (acquisizione nella fascia oraria 08:00-18:00) per esperimenti di durata inferiore a 2 h;
2. “coda notturna” (acquisizione nella fascia oraria 18:00-8:00) per esperimenti di durata compresa tra 2 e 12 h (esperimenti di durata superiore alle 12 h possono essere acquisiti solo durante il fine settimana);
3. “esperimenti con priorità” (acquisizione immediata dopo il completamento dell'esperimento in corso), da utilizzarsi solo ed esclusivamente in casi



particolari (es. campioni labili o sensibili) e, in ogni caso, previa autorizzazione della responsabile scientifica e di tutte/i le/gli utenti in coda.

Al fine di garantire un corretto funzionamento del servizio NMR, l'utilizzo di esperimenti con priorità deve essere limitato al minimo necessario.

Tutte/i le/gli utenti del Dipartimento di Chimica con accesso allo strumento devono contribuire attivamente alle operazioni di *refill* dell'azoto liquido (realizzate con una cadenza di 10 giorni, su calendario programmato). Per ragioni di sicurezza la ricarica deve essere obbligatoriamente svolta da due operatori che abbiano conseguito la formazione necessaria per queste operazioni, con documentazione della formazione e della consegna dei DPI necessari. Ogni operazione deve essere correttamente registrata e l'utilizzo dei DPI documentato.

Consegna degli esperimenti e campioni

Gli spettri sono forniti in formato elettronico, *raw data* in formato proprietario Bruker (cartelle Bruker Topspin), senza ulteriori elaborazioni. Le cartelle sono trasferite su opportuno supporto elettronico fornito dal richiedente, che ne deve previamente verificare l'assenza di virus informatici e software malevoli.

I dati Bruker possono essere elaborati mediante il software proprietario Topspin o *software open source*, da reperire a carico del committente.

I campioni analizzati potranno essere ritirati previo appuntamento con la responsabile tecnica del servizio. I campioni potranno essere consegnati solo alle persone indicate.



Quote per l'utilizzo dello strumento

1. Membri del Dipartimento di Chimica

a. Costo per spettri singoli

Spettri ed esperimenti effettuati da personale strutturato abilitato all'uso dello strumento.

Tipo di spettro	Quantità campione in mmoli	Costo campione pronto* in euro	Costo campione da preparare** in euro
$^1\text{H o }^{19}\text{F}$	$\geq 0,1$	10	20
^{13}C	$\geq 0,2$	10	20
$^1\text{H o }^{19}\text{F}$	$<0,1$	30	40
^{13}C	$<0,2$	40	50
HSQC	$\geq 0,1$	30	40
HMBC	$\geq 0,2$	100	110
COSY	$\geq 0,1$	100	110
NOESY	$\geq 0,1$	100	110

*La preparazione dei campioni richiede la solubilizzazione del campione da analizzare in 0,6 ml di solvente deuterato.

**Il tubo NMR (diametro 5 mm) dovrà essere fornito insieme al campione.

Il costo totale del servizio è quantificato in fase preventiva attraverso la sottoscrizione di una proposta (realizzata mediante apposito modulo con i riferimenti necessari per l'addebito delle quote).

b. Costo della quota associativa annuale:

Numero di ore di tempo macchina mensili	Quota (€)
Fino a 2 (120 min)	250
Fino a 5 (300 min)	500
Accesso libero	1200

Il pagamento delle quote delle quote associative annuali è disposto a inizio anno solare attraverso la sottoscrizione di un apposito modulo nel quale devono essere indicati i riferimenti necessari per l'addebito delle quote.

Le/Gli utenti che sottoscrivono l'abbonamento a "tempo definito" devono rendicontare l'utilizzo del tempo macchina, per una verifica mediante il sistema di *accounting* automatico dello strumento.

Per il calcolo del tempo macchina definito, gli esperimenti sono divisi in tre categorie:

Esperimento	Durata (min)
^1H	15
^{13}C	30
Esperimenti fino a 2 ore	45, 60, 75, 90, 105, 120

Il numero totale di minuti di acquisizione non può superare, per ogni abbonamento, quelli specificati nella tabella precedente.



2. Personale esterno al Dipartimento di Chimica ma interno a Sapienza

a. Costo per spettri singoli

Spettri ed esperimenti effettuati da personale strutturato abilitato all'uso dello strumento.

Tipo di spettro	Quantità campione in mmoli	Costo campione pronto* in euro	Costo campione da preparare** in euro
^1H o ^{19}F	$\geq 0,1$	30	40
^{13}C	$\geq 0,2$	30	40
^1H o ^{19}F	$<0,1$	90	100
^{13}C	$<0,2$	90	100
HSQC	$\geq 0,1$	90	100
HMBC	$\geq 0,2$	300	310
COSY	$\geq 0,1$	300	310
NOESY	$\geq 0,1$	300	310

*La preparazione dei campioni richiede la solubilizzazione del campione da analizzare in 0,6 ml di solvente deuterato.

**Il tubo NMR (diametro 5 mm) dovrà essere fornito dal richiedente insieme al campione

Il costo totale del servizio è quantificato in fase preventiva attraverso la sottoscrizione di una proposta (realizzata mediante apposito modulo con i riferimenti necessari per l'addebito delle quote).

Non saranno accettate richieste di spettri per un ammontare inferiore a € 150.



b. Costo della quota associativa annuale a “tempo definito”

La quota associativa prevede 10 ore di tempo macchina mensili (per esperimenti fino a 2 h di acquisizione in fascia diurna) + 2 esperimenti da 12 h di acquisizione al mese: € 2.000.

Il pagamento delle quote associative sarà disposto in fase preventiva attraverso la sottoscrizione di un apposito modulo con l'indicazione dei riferimenti necessari per l'addebito delle quote.

Le/Gli utenti che sottoscrivono la quota associativa annuale a tempo definito devono rendicontare l'utilizzo del tempo macchina, per l'eventuale verifica mediante il sistema di *accounting* automatico dello strumento.

Il tempo totale di acquisizione degli esperimenti previsti dalla quota associativa annuale a “tempo definito” non può superare i tempi dei singoli esperimenti indicati nella seguente tabella:

Esperimento	Durata (min)
^1H	15
^{13}C	30
Esperimenti fino a 2 ore (fascia diurna)	45, 60, 75, 90, 120
Esperimenti di 12 h (fascia notturna)	12 ore



3. Utenti esterni a Sapienza

a. Costo per spettri singoli

Gli spettri sono effettuati da personale strutturato abilitato all'uso dello strumento secondo il seguente tariffario:

Tipo di spettro	Quantità campione in mmoli	Costo campione pronto* in euro	Costo campione da preparare** in euro
^1H o ^{19}F	$\geq 0,1$	60	70
^{13}C	$\geq 0,2$	60	70
^1H o ^{19}F	$<0,1$	120	140
^{13}C	$<0,2$	120	140
HSQC	$\geq 0,1$	120	140
HMBC	$\geq 0,2$	350	360
COSY	$\geq 0,1$	350	360
NOESY	$\geq 0,1$	350	360

*La preparazione dei campioni richiede la solubilizzazione del campione da analizzare in 0,6 ml di solvente deuterato.

**Il tubo NMR (diametro 5 mm) dovrà essere fornito insieme al campione

Non saranno accettate richieste di spettri per un ammontare inferiore a € 500.

b. Costo della quota associativa annuale.

Sono previste tre tipologie di quota associativa in base al numero di spettri NMR:

- 50 spettri l'anno (^1H o ^{19}F e ^{13}C con quantità di campione minima di 0,02 mmoli e 0,1 mmoli rispettivamente): € 3.000,00.



- 100 spettri l'anno (^1H o ^{19}F e ^{13}C con quantità di campione minima di 0,02 mmoli e 0,1 mmoli rispettivamente): € 5.000,00.
- 200 spettri l'anno (^1H o ^{19}F e ^{13}C con quantità di campione minima di 0,02 mmoli e 0,1 mmoli rispettivamente): € 10.000.

La richiesta di esperimenti bidimensionali o di campioni che non superano la quantità minima prevista non è compresa nella quota associativa e il pagamento sarà effettuato, in base alle tariffe riportate sopra, o riducendo il numero di spettri previsti annualmente secondo le seguenti conversioni:

- HSQC = 2 spettri
- HMBC = 6 spettri
- COSY = 10 spettri
- NOESY = 20 spettri

Questi spettri sono effettuati da personale strutturato abilitato all'uso dello strumento. I campioni devono essere consegnati dal richiedente già disciolti nel solvente deuterato e nel tubo NMR (diametro 5 mm), riconsegnato insieme al FID dell'esperimento realizzato.

Tali attività rientrano nell'ambito delle convenzioni conto terzi.

I costi si intendono al netto dell'IVA.



Sistema di gestione SSL

Per garantire un percorso di acquisizione della consapevolezza del rischio unitamente a un modello di gestione del medesimo che sia improntato a regole concrete e applicabili sono messe a punto e costantemente aggiornate le procedure di utilizzo della strumentazione.

È possibile prendere visione della documentazione nella pagina dedicata al servizio sul sito web del Dipartimento di Chimica.

Le/gli utenti che operano sulla strumentazione sono obbligate/i alla lettura critica della documentazione.