

## Regolamento diffrattometro Xcalibur Dipartimentale

Il servizio di diffrazione di raggi X da cristallo singolo dispone di un diffrattometro Xcalibur O che opera con goniometro a 4 cerchi in geometria kappa a T ambiente ( $\lambda = \text{Mo K}\alpha$ ). È equipaggiato con un generatore di raggi X Spellman DF60N3, un detector Opal CCD, un video microscopio con illuminazione a fibre ottiche. Lavora con il pacchetto software *CrysAlisPro*.

Il responsabile scientifico e tecnico dello strumento è il Prof. Gustavo Portalone ([gustavo.portalone@uniroma1.it](mailto:gustavo.portalone@uniroma1.it))

### Accesso al servizio

Lo strumento è a disposizione di tutti i componenti del Dipartimento di Chimica, del personale Sapienza e di persone esterne all'Ateneo previo pagamento della singola raccolta, ed eventuale elaborazione, dei dati (vedi quote differenziate per tipologia in calce). Lo strumento è a disposizione anche di persone esterne all'Ateneo previa stipula di una convenzione conto terzi. Le quote acquisite serviranno alla gestione ordinaria dello strumento che prevede l'acquisto periodico del tubo a raggi X e un servizio di manutenzione.

L'accesso al laboratorio di diffrazione X (Edificio Cannizzaro CU014, stanza 054) è regolamentato secondo le disposizioni Sapienza.

L'analisi può essere condotta unicamente su cristalli singoli di composti inorganici, organici e organometallici che vanno cresciuti dall'utente. La scelta dell'individuo cristallino da sottoporre ad analisi, ed il suo montaggio su fibra o in capillare, è effettuato dal responsabile tecnico.

## **Prenotazione**

Per prenotare una raccolta dati si deve contattare via e-mail il responsabile tecnico al fine di definire la data, le modalità di raccolta e di analisi dei dati ed il modo più adatto per il trasferimento dei risultati, specificando:

nome del richiedente;

qualifica del richiedente;

gruppo di ricerca;

ente di appartenenza;

indirizzo e-mail;

numero di telefono;

e allegando il 'modulo servizio XRD' (ALLEGATO 1), debitamente compilato e firmato.

## **Quote per l'acquisizione dei dati diffrattometrici**

### **1. Personale interno al Dipartimento di Chimica**

Costo per singola raccolta dati: 20 euro/ora di raccolta

Costo per elaborazione dati: 70 euro/ora di elaborazione (risoluzione ed affinamento della struttura)

### **2. Personale esterno al Dipartimento di Chimica ma interno all'Università "Sapienza"**

Costo per singola raccolta dati: 30 euro/ora di raccolta

Costo per elaborazione dati: 80 euro/ora di elaborazione (risoluzione ed affinamento della struttura)

### **3. Personale esterno all'Università "Sapienza"**

Costo per singola raccolta dati: 40 euro/ora di raccolta

Costo per elaborazione dati: 90 euro/ora di elaborazione (risoluzione ed affinamento della struttura)



ALLEGATO 1

**REQUEST FOR X-RAY SINGLE-CRYSTAL STRUCTURE DETERMINATION**

Date.....

COMPOUND:.....

.....

CAS RN:.....

Molecular formula of sample:.....

MW (Dalton):.....

Line drawing of (expected) structure showing preferred atom numbering scheme:

Origin of the compound:.....

Solvent(s) of preparation/crystallization:.....

Melting point (°C):.....

Stability to the air:.....

Color of the sample:.....

Chiral:.....

What do you want to get from the crystallographic analysis:

.....

.....

References:.....

.....

Comments:.....

.....

Signature:..... Address:.....

Phone:.....

*X-ray Diffraction Service's comments (staff only):*.....

.....