

**COME È FATTA LA STRUTTURA CRISTALLINA DELL'ACIDO
ACETILSALICILICO C₉H₈O₄? SCOPRIAMO IL SOFTWARE
EXPO (A. Altomare, C. Cuocci, C. Giacobazzo, A. Moliterni, R. Rizzi, N. Corriero and A.
Falcicchio, (2013). J. Appl. Cryst. 46, 1231-1235)**

Per scaricare il software EXPO (registrarsi e scaricare gratuitamente):

<http://www.ba.ic.cnr.it/softwareic/expo/expo2014-download/>

Per eseguire il programma EXPO sui dati diffrattometrici a disposizione è possibile:

1. creare un nuovo progetto
2. utilizzare un file ASCII di input già preparato (lo chiamiamo '*aspirina.exp*').

Nel primo caso:

- a) Fare doppio clic sull'icona EXPO;
- b) Selezione '**File**' dal menù in alto a sinistra;
- c) '**Import diffraction pattern**' (importare lo spettro di diffrazione), scegliere il file aspirina.xy e selezionare **OK**;
- d) Compare una finestra di dialogo '**Set wavelength radiation**' (Definisci la lunghezza d'onda), scegliere Wavelength = 1.54056 e Radiation = X-ray e selezionare **OK**. Compare lo spettro di diffrazione;
- e) Per determinare la cella cristallina (processo di indicizzazione), dal menù in alto a sinistra selezionare, '**Pattern**' >> '**Indexing**' e '**NTREOR09**'. Si può utilizzare anche DICVOL06 o McMaille (altri programmi di calcolo per determinare la cella).
- f) Osservare il profilo di diffrazione (finestra grande): se ci sono dei picchi che non sono stati selezionati, andare in zoom (tastino in alto ) e aggiungere i picchi mancanti con il tastino in alto  e il tasto sinistro del mouse (per cancellarli con il tasto destro). Cliccare quindi su '**Run**' nella finestra piccola centrale;
- g) Alla fine del processo si aprirà una finestra che contiene una lista di celle ordinate secondo una figura di merito (M20). La cella con il valore di M20 più alto dovrebbe essere quella corretta. Selezionarla con il mouse e dare '**OK**';
- h) A questo punto, è necessario introdurre il contenuto di cella dell'aspirina: (C₉ H₈ O₄)₄; poi) '**OK**';
- i) Selezionare '**Next**' ripetutamente (3 volte) dal menù in alto a destra per andare avanti;
- l) Compare una lista con i gruppi spaziali. Selezionare il gruppo spaziale 'p 21/c';
- m) '**OK**' (il file '*aspirinal.exp*' viene creato);
- n) '**OK**';
- o) cliccare '**Next**' ripetutamente;
- p) il modello che si ottiene, non è corretto; è necessario selezionare dal menù in alto a sinistra '**Solve**' poi selezionare '**Explore trials**' e poi selezionare '**Explore trials not processed yet**' e '**GO**'.
- q) per completare il modello è necessario selezionare dal menù in alto a sinistra '**Refine**' poi selezionare '**Resolution Bias Modification (RBM)**' e poi selezionare '**RBM (Direct Space)**';
- r) una volta ottenuto il modello strutturale è possibile eseguire delle operazioni grafiche su questo modello: aggiungere la specie chimica ad ogni posizione atomica () , applicare la simmetria (); visualizzare la cella () e applicare altre operazioni che potrete esplorare utilizzando il menù del programma;

Secondo caso (quando il file *aspirinal.exp* è già pronto):

- a) Fare doppio clic sull'icona EXPO;
- b) **'File'** nel menù in alto a sinistra;
- c) **'Load & Go'**;
- d) Selezionare '*aspirinal.exp*' come File di Input di EXPO.
- e) **'Go'**;
- f) **'Next'**
- g) Ripetere i passaggi da f) precedente.