

Informació sobre la cua de rutina



Pàgina en procés d'actualització. La informació continguda podria no ser acurada i/o actual

Descripció breu

Si ens heu d'enviar un nombre baix de mostres, segurament no us sortirà a compte comprar els tubs de rmn i els solvents deuterats, En aquests casos, com que les mostres les haurem de preparar nosaltres, per cadascuna de les mostres ens haureu d'indicar,

- el solvent en què l'hem de dissoldre, i la solubilitat de la mostra en el solvent triat (*);
- la quantitat de mostra a dissoldre, tenint present que el volum final serà aproximadament de 0,6 a 0,7 mil·lilitres; i
- qualsevol indicació o precaució a tenir present en la preparació de la mostra.

(*) Els solvents deuterats són més cars que els no enriquits isotòpicament, per això és convenient que comproveu la solubilitat de la mostra al solvent (versió no deuterada) triat.

Alhora, tampoc és raonable sol·licitar-nos un compte al servidor de dades per poder recuperar les vostres dades. És per això que, un cop adquirits els espectres, us els farem arribar per correu electrònic en format de fitxer comprimit.

Per ara aquesta pàgina és un recull de diverses informacions d'interès pels usuaris.

Consultar la cua de rutina

La [cua de rutina](#) es pot consultar on-line, i proporciona informació sobre [l'estat actual de la cua](#) i el [registre d'experiments més recents](#).

Descripció detallada del funcionament de la cua de rutina

El fitxer [Informació de la Cua de Rutina per Indústria \(v. 2006-10-31\)](#) conté una breu descripció del funcionament de la cua de rutina per empreses, així com el cost de cadascun dels tipus d'espectres i d'altres tasques com la preparació de les mostres i la representació dels espectres adquirits

(COMPTE! les tarifes esmentades al document són de 2006.)

Tarifes de la cua de rutina

Les tarifes oficials per empreses es poden consultar a la web del SeRMN:

- [Tarifa per empreses](#)

Les empreses pertanyents al [Parc de Recerca UAB \(PRUAB\)](#) es beneficien d'una tarifa reduïda:

- [Tarifa per empreses del PRUAB](#)

Condicions de funcionament

Horari de càrrega

El robot es carrega de dilluns a divendres, a les 10:00, 13:00 i 17:00 hores.

El personal del SeRMN podrà carregar-lo excepcionalment més cops, per exemple, quan ho pugui combinar amb les altres tasques que estigui realitzant, quan el robot estigui parat, en casos de mostres que requereixen l'adquisició immediata de l'espectre, etcètera.

Experiments disponibles

Monodimensionals	Bidimensionals
^1H	^1H - ^1H COSY
^{13}C	^1H - ^{13}C NOESY
DEPT-135	^1H - ^1H TOCSY
^{31}P	^1H - ^{13}C HSQC
$^{31}\text{P}\{^1\text{H}\}$	^1H - ^{13}C HSQCed
	^1H - ^{13}C HMBC

Per més informació sobre aquests experiments i la informació que proporcionen podeu consultar els *Exemples d'experiments (en el 360 MHz)* disponibles a [Manuals del SeRMN](#).

Condicions de les mostres i tubs per la cua de rutina

Les condicions que han de complir les mostres que portis a la cua de rutina venen condicionades pel fet que els tubs són carregats a l'espectròmetre per un robot bescanviador de mostres, i perquè l'adquisició es fa de forma automatitzada, sense intervenció de cap operador que pugui adaptar les condicions d'adquisició a les característiques de la mostra.

Especificació	Condició a complir	Actuació en cas d'incompliment
Condicions de la mostra		
Quantitat	La màxima possible	Es programa la mostra [1]
Volum de solvent	aprox. 0,7 ml	Mostra descartada [2]
Alçada de la mostra	aprox. 4 cm	Mostra descartada [2]
El tub de rmn		
Diàmetre extern	5 mm	Mostra descartada [3]
Llargada mínima del tub	17 cm	Mostra descartada [4]
Estat del tub	Extrem superior no estarà trencat o esquerdat	Mostra descartada [5]

Especificació	Condicció a complir	Actuació en cas d'incompliment
Condicions de la mostra		
Etiquetat del tub		
A la part superior del tub o en el tap		Risc de mostra descartada [6]
Els 13 cm inferiors del tub no han de tenir cap tipus d'identificació (escrits, etiquetes enganxades, etcètera)		Mostra descartada [7]

[1] Procurar no alteraran significativament les condicions de viscositat del solvent. Una major viscositat comporta pics més amples, és a dir, menor resolució.

[2] La rutina encarregada de millorar l'homogeneïtat del camp magnètic està optimitzada per un volum de mostra en el rang 0,6-0,8 ml, que corresponen aproximadament a 4 ± 1 cm. Un volum de mostra insuficient comporta que es descarti automàticament la mostra. Les mostres amb un volum excessiu es programen, però l'espectre podria no tenir una qualitat òptima. Per altra banda, utilitzar un excés de dissolvent implica un major cost innecessari de la preparació de la mostra. Al document [Requisits de les Mostres per la Cua de Rutina](#) trobaràs una plantilla a mida real de les condicions a complir pel tub i mostra.

[3] Consultar més avall les especificacions mínimes exigides

[4] El robot bescanviador de mostres no pot manipular correctament tubs amb una llargada inferior a 17 cm.

[5] L'extrem superior del tub és per on els agafa el robot bescanviador de mostres. Un extrem superior fràgil (trencat o esquerdat) comporta que es descarti el tub.

[6] S'intentarà programar la mostra. Recorda que has d'escriure al tub el *nom de la mostra* escrit a la butlleta de registre,

- usuaris interns: inicials + número d'ordre (entre 001 i 999),
- usuaris externs: número d'ordre (entre 001 i 999) i nom de la mostra

[7] Aquesta és la part del tub en contacte amb el suport del tub (*spinner*) i amb la sonda. Si no es pot netejar fàcilment aquesta part del tub es descartarà la mostra.

Espectres de carboni-13 i DEPT-135

En el cas dels espectres de [carboni-13](#) (^{13}C) o [DEPT-135](#) el cost final dependrà del temps necessari per adquirir l'espectre, que alhora dependrà de,

- la quantitat de mostra dissolta. El fitxer [Temps d'acumulació per 13C i DEPT a la Cua de Rutina](#) conté una taula resum del nombre d'escombrats/temps d'acumulació recomanats en funció de la quantitat de mostre dissolta al tub. Per exemple,
 - una concentració de mostra de 40 mg/tub (0,6-0,7 ml) comporta un temps d'adquisició inferior a les 2 hores; mentre que
 - una concentració de mostra de 20 mg/tub (0,6-0,7 ml) fa que el temps d'acumulació s'allargui fins les 8 hores.
- La relació senyal-soroll desitjada. A la taula del punt anterior s'esmenten dues *qualitats* d'espectre,
 - la *qualitat recerca* és suficient pels espectres de treball: anàlisi rutinari de mostres, control de reaccions, etcètera; mentre que

- la *qualitat publicació* és la recomanada per espectres de referència, per exemple, figures de publicacions internes o externes.

Per altra banda, cal tenir present que els espectres de ^{13}C s'adquireixin habitualment en condicions no quantitatives ($\text{TR} < 5 \cdot T_1$, impuls d'excitació de 30°). Adquirir els espectres en condicions semi-quantitatives o quantitatives —és a dir, que hi hagi una major o total proporcionalitat entre la intensitat dels pics i el nombre d'àtoms de ^{13}C — comporta l'ús d'un impuls de 90° i de temps de reciclatge més llargs, per exemple, de 3, 5 ó 10 segons). Això es tradueix en un major temps d'acumulació per un mateix nombre d'escombrats, fet que redunda en un major cost dels espectres.

Altres fitxers d'interès

- [Recomanacions per la compra de tubs de rmn.](#)
- [Especificacions dels tubs de rmn.](#)

From:

<https://sermn.uab.cat/wiki/> - **SeRMN Wiki**

Permanent link:

https://sermn.uab.cat/wiki/doku.php?id=informacio_cua_rutina&rev=1497951821

Last update: **2017/06/20 11:43**

