

# Informació per indústria - Cua de rutina

Aquesta pàgina majoritàriament conté informació d'interès per les empreses que vulguin portar mostres a la cua de rutina. També conté certa informació sobre la possibilitat de portar mostres a analitzar amb altres espectròmetres.

## Descripció breu

Si ens heu d'enviar un nombre baix de mostres no us surt 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.

## 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 actuals les podeu consultar a la [web del SeRMN](#).

### 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                        |
|-------------------------------|---------------------------------------|
| $^1\text{H}$                  | $^1\text{H}$ - $^1\text{H}$ COSY      |
| $^{13}\text{C}$               | $^1\text{H}$ - $^1\text{H}$ NOESY     |
| DEPT-135                      | $^1\text{H}$ - $^1\text{H}$ TOCSY     |
| $^{31}\text{P}$               | $^1\text{H}$ - $^{13}\text{C}$ HSQC   |
| $^{31}\text{P}\{^1\text{H}\}$ | $^1\text{H}$ - $^{13}\text{C}$ HSQCed |
|                               | $^1\text{H}$ - $^{13}\text{C}$ 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                                                                                                   | Condicció a complir                           | Actuació en cas d'incompliment       |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------|--------------------------------------|
| <b>Condicions de la mostra</b>                                                                                  |                                               |                                      |
| Quantitat                                                                                                       | La màxima possible                            | Es programa la mostra <b>[1]</b>     |
| Volum de solvent                                                                                                | aprox. 0,7 ml                                 | Mostra descartada <b>[2]</b>         |
| Alçada de la mostra                                                                                             | aprox. 4 cm                                   | Mostra descartada <b>[2]</b>         |
| <b>El tub de rmn</b>                                                                                            |                                               |                                      |
| Diàmetre extern                                                                                                 | 5 mm                                          | Mostra descartada <b>[3]</b>         |
| Llargada mínima del tub                                                                                         | 17 cm                                         | Mostra descartada <b>[4]</b>         |
| Estat del tub                                                                                                   | Extrem superior no estarà trencat o esquerdat | Mostra descartada <b>[5]</b>         |
| <b>Etiquetat del tub</b>                                                                                        |                                               |                                      |
| A la part superior del tub o en el tap                                                                          |                                               | Risc de mostra descartada <b>[6]</b> |
| Els 13 cm inferiors del tub no han de tenir cap tipus d'identificació (escrits, etiquetes enganxades, etcètera) |                                               | Mostra descartada <b>[7]</b>         |

**[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 optimitada per un volum de mostra en el rang 0,6-0,8 ml, que corresponen aproximadament a  $4 \pm 1$  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](#) ( $^{13}\text{C}$ ) 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  $^{13}\text{C}$  s'adquireixin habitualment en condicions no quantitatives ( $\text{TR} < 5 \cdot T_1$ , impuls d'excitació de  $30^\circ$ ). 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  $^{13}\text{C}$ — comporta l'ús d'un impuls de  $90^\circ$  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.

## Recuperació de les dades

Actualment la recuperació de les dades es fa accedint al servidor de dades, fent servir un client de FTP que permeti connexions encriptades, per exemple, el [FileZilla](#). Alhora, cada grup de recerca i empresa té un compte d'usuari d'ús exclusiu amb el que només pot accedir a les seves carpetes de dades als instruments. D'aquesta forma oferim un nivell raonable de seguretat i privacitat en l'accés i

transferència de les vostres dades.

Per més informació sobre el nostre servidor de dades, i sobre com configurar i emprar el programa FileZilla, consulta la pàgina [d'informació pels usuaris](#).

## Dades fiscals de l'empresa

Si no sou clients habituals del SeRMN, per poder-vos donar d'alta com a clients cal que ens feu arribar les vostres dades a través del [Formulari de dades de l'empresa](#)

## Adreça de contacte

Per qualsevol informació addicional, podeu posar-vos en contacte amb nosaltres a l'adreça

- Servei de Ressonància Magnètica Nuclear (SeRMN)  
Facultats de Ciències i Biociències  
Universitat Autònoma de Barcelona  
Edifici Cs, Campus de Bellaterra, s/n  
08193 - Cerdanyola del Vallès  
Telefon: +34-93-581-2291  
E-mail: [s.rmn@uab.cat](mailto:s.rmn@uab.cat)

o a través del [Formulari de contacte](#) (*Contact form*)

## 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\\_industria&rev=1448875521](https://sermn.uab.cat/wiki/doku.php?id=informacio_industria&rev=1448875521)

Last update: **2015/11/30 10:25**

