

**Servei de Resonància Magnètica Nuclear (SERMN)  
Universitat Autònoma de Barcelona**

**INFORMACIÓ SOBRE LA CUA DE RUTINA - 2006-10-31**

**ESPECTROMETRE**

Els espectres s'adquireixen a l'espectròmetre AVANCE DPX-250 equipat amb un bescanviador de mostres BACS amb capacitat per 60 tubs.

**PREPARACIÓ DE LA MOSTRA**

Us recomanem que us prepareu la mostra vosaltres mateixos. Per això us caldrà comprar tubs de rmn (cars, però reutilitzables) i solvents deuterats. En els documents que us adjuntem trobareu informació sobre,

- ◆ les especificacions mínimes que han de complir els tubs,
- ◆ exemples de tubs actualment disponibles i la seva idoneïtat pels diferents espectròmetres del SeRMN, així com
- ◆ les adreces dels dos proveïdors dels fabricants de major prestigi: Wilmad i New-Era.

La quantitat de mostra necessària per la realització d'espectres de protó no és gaire. Si la mostra és un sòlid n'hi ha prou amb 5-10 mg, si la mostra és líquida n'hi ha prou amb 50-100 µl.

Heu de tenir present que si la mostra no és pura caldrà augmentar les quantitats anteriors per compensar la menor quantitat de mostra per unitat de pes o volum.

La mostra haurà de dissoldre's en el solvent deuterat fins un volum final de 600 a 750 µl.

La preparació final ha d'ésser homogènia, és a dir, no ha de contenir precipitats, cristalls, agregats, etc. L'addició de la mostra tampoc hauria de canviar de forma substancial la viscositat del solvent.

Per cada mostra s'ha d'especificar:

- ◆ El vostre codi o número de referència.
- ◆ La quantitat aproximada. Aquesta dada és especialment important pels experiments de llarga durada, ja que el nombre d'acumulacions es fixa en funció de la quantitat de mostra.
- ◆ L'experiment o experiments a realitzar.
- ◆ Els paràmetres d'adquisició que voleu canviar respecte els estàndards.

◆ El dissolvent deuterat emprat o desitjat.

Si voleu processar la mostra a la cua de rutina i porteu la mostra vosaltres mateixos, llavors heu d'emplenar la butlleta de la cua de rutina amb la informació anterior.

## QUAN TRIGUEM EN PROCESSAR LES MOSTRES

### *Espectres de 1-H*

Pel que fa a les mostres ja preparades, si l'espectròmetre funciona correctament, l'adquisició dels espectres de protó a la cua de rutina acostuma a tenir lloc el mateix dia si rebem la mostra abans del migdia, o al dia següent si la rebem a darrera hora de la tarda.

Si hem de preparar la mostra, llavors cal tenir present la disponibilitat de temps del personal del SeRMN. Habitualment podeu comptar amb tenir els espectres de 1H disponibles abans de 24 hores, però no es garanteix la seva disponibilitat abans de 36 hores, sense comptar els caps de setmana.

Si també hem de processar les dades i representar els espectres, llavors no podem garantir la disponibilitat dels resultats abans de 48 hores, sense comptar els caps de setmana.

### *Espectres de 13-C i DEPT-135*

Els caps de setmana, des de divendres a les 18pm fins dilluns a les 9am, té prioritat l'adquisició d'espectres de 13C i DEPT-135 de llarga durada.

La gran disparitat en temps d'adquisició dels espectres considerats de llarga durada (des de unes poques hores fins a dies) fa que la programació estigui subjecte a grans variacions, i que no ens podem comprometre a tenir els espectres en un termini de temps concret. La programació dels espectres de llarga durada la podeu consultar a,

[http://sermn01.uab.es/a250-robot/icon\\_13C-queue.html](http://sermn01.uab.es/a250-robot/icon_13C-queue.html) (\*)

(\*) SERVEI ACTUALMENT NO DISPONIBLE

En casos urgents o si la mostra es fa malbé, es pot prioritzar el processament de la mostra.

La cua de rutina es pot consultar via Internet a,

[http://sermn01.uab.es/a250-robot/icon\\_setup.html](http://sermn01.uab.es/a250-robot/icon_setup.html)

i la llista d'espectres recentment adquirits està

disponible a,

[http://sermn01.uab.es/a250-robot/icon\\_history.html](http://sermn01.uab.es/a250-robot/icon_history.html)

Les mostres a processar fora de la cua de rutina acostumen a prendre més temps en funció de la disponibilitat de l'espectròmetre desitjat.

#### **DISPONIBILITAT DELS ESPECTRES**

Si voleu processar-vos els espectres (veure més avall) caldrà que us obrim un compte restringit al nostre servidor de dades per tal que pugueu recuperar els fitxers dels vostres espectres a través d'un client de FTP.

Un client de FTP actual, és el Filezilla, que us podeu descarregar de,

<http://filezilla.sourceforge.net/>

Alternativament, el personal del SeRMN es pot encarregar del processament i representació dels espectres, i enviar-vos-els per email en el format PDF.

#### **TARIFES I FACTURACIÓ**

Les tarifes que s'indiquen a continuació corresponen a les mostres processades a la cua de rutina. A la taula següent es resumeixen els criteris emprats per la tarifació dels espectres.

Classe 1	<ul style="list-style-type: none"><li>◆ espectres de protó amb durada màxima de fins 15 minuts, i</li><li>◆ espectres de carboni, DEPT, o fòsfor amb durada màxima de fins 30.</li></ul>
Classe 2	<ul style="list-style-type: none"><li>◆ espectres de protó amb durada des de 15 minuts fins a 2 hores, i</li><li>◆ espectres de carboni, DEPT o fòsfor amb durada des de 30 minuts fins a 2 hores.</li></ul>
Classe 3	<ul style="list-style-type: none"><li>◆ espectres amb durada superior a 2 hores</li></ul>

Les tarifes vigents a partir l'1 d'octubre de 2006 es poden consultar a la taula següent.

Concepte	Tarifa [1] [2]
Espectre de classe 1	7,560 €
Espectre de classe 2	15,120 €
Espectre de classe 3	22,680 €
Preparació de la mostra [3]	7,560 €
Processament i representació dels espectres	3,780 €

[1] no s'inclou l'IVA del 16%

[2] inclou el cànon de la UAB (del 20% a partir de 01/oct/2006).

[3] només amb els solvents més comuns: CDCl<sub>3</sub>, Acetona, DMSO i MeOD. Per altres solvents, consultar disponibilitat i preu.

Per exemple,

- ◆ el cost final, incloent-hi l'IVA, d'un espectre de protó d'una mostra ja preparada és de 8,77 € (8,7696 €),
- ◆ per una mostra de 50 mg, que s'ha de preparar, i de la qual s'han d'adquirir i representar espectres de protó (classe 1), carboni i DEPT-135 (ambdós classe 2), el cost final, incloent-hi l'IVA, és de 65,77 €.

Habitualment, al llarg de la primera quinzena del mes següent al d'haver processat les mostres us farem arribar una nota resum del que tenim previst facturar-vos. Si transcorreguts uns dies no ens heu fet avinent cap error o discrepància, iniciarem els tràmits de facturació.

## SOFTWARE

Si us voleu processar els espectres us recomanem el programa de processament MestRe-C que us podeu baixar de la següent adreça,

<http://www.mestrelab.com/>