



## BASES PER L'ACCÉS A L'EQUIP DE RMN VARIAN VNMRS DE 500 MHz PER USUARIS DE RMN DE NIVEL AVANÇAT

### 1-INTRODUCCIÓ

L'espectròmetre de RMN Varian Agilent model VNMRS de 500 MHz és un equip amb un imant apantallat de 11.74 T (500 MHz) instal·lat en 2009 i ubicat al soterrani -2 del laboratori de RMN del PCB. Aquest equip estarà destinat a donar servei en mode manual als usuaris de l'UB que ho sol·licitin de manera justificada. Aquest protocol defineix les condicions d'accés en aquesta modalitat.

#### 1.1 Característiques de l'equip Varian-Agilent VNMRS 500

L'equip incorpora una sonda *Oneprobe* de temperatura ambient per a tubs de 5 mm capaç de detectar experiments de  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ ,  $^{19}\text{F}$ ,  $^{31}\text{P}$  i  $^{11}\text{B}$ -RMN. Disposa d'un mòdul de sintonia automàtica que permet sintonitzar des de l'estació de treball. A mode comparatiu, respecte de l'equip B500 de Química aquest equip té ~20% menys de sensibilitat en  $^1\text{H}$  ~40% menys en  $^{13}\text{C}$ , mentre que respecte dels equips B400 amb criosonda la reducció de sensibilitat és de ~35% en  $^1\text{H}$  i ~55% en  $^{13}\text{C}$ .

El funcionament d'aquest equip és completament en mode manual. L'espectròmetre està descatalogat per tancament de l'empresa fabricant el 2014 i per aquesta raó no es pot automatitzar. El sistema operatiu es un CentOS 5 i el software VnmrJ 3.1-A.

Treballar en mode manual implica que absolutament totes les etapes del procés d'adquisició han de ser executades per l'usuari (introducció de mostra, sintonia, cerca de lock, ajust de shims, tria de seqüència de polsos, ajust de condicions experimentals, enviament de les dades al servidor, entre d'altres). Això fa que la qualitat de l'espectre depengui de l'experiència i perícia de l'usuari. En aquest sentit l'equip VNMRS 500 no és competitiu a l'hora de reservar-lo per fer experiments ràpids si el compara amb els equips Bruker que actualment funcionen amb els canviadors automàtics.

### 2-MODE DE FUNCIONAMENT

#### 2.1 Què pot aportar l'equip Varian-Agilent VNMRS 500 als usuaris de RMN?

Aquest equip està destinat a aquells usuaris que **de forma regular** tinguin necessitats especials que no puguin ser cobertes pels altres equips de la Unitat a la Facultat de Química, la Facultat de Farmàcia o el PCB. S'entén per necessitats especials, aquells experiments de RMN que no son susceptibles d'automatització i que requereixin temps d'accessos llargs, seqüències de polsos no estàndard o condicions experimentals fora de l'àmbit més habitual cinètiques, seguiment de reaccions, de valoracions, etc.



## 2.2 Condicions de l'accés al VNMRS500

L'accés a l'equip està destinat només pels usuaris que tinguin l'experiència prèvia i els coneixements en RMN suficients per fer un us responsable i treure profit d'un equip de 500 MHz que opera en mode manual. Per aquesta raó:

- L'accés serà no supervisat pels tècnics de RMN i la tria dels experiments i la seva execució serà responsabilitat dels usuaris que hauran de conèixer els límits de l'equip (sintonia, potència dels polsos, temperatura, etc.) El personal del servei, durant el curs de formació, assessorarà sobre els experiments que hagi fet constar en la seva sol·licitud d'utilització que està interessat.
- A diferència d'altres equips de la Unitat, el VNMRS500 no tindrà assistència tècnica immediata en cas que un usuari reporti problemes.
- Altrament, el personal del servei únicament es responsabilitzarà de fer les comprovacions bàsiques per garantir el bon funcionament de l'equip.

## 3-PRIMERA CONVOCATÒRIA DE L'ACCÉS A L'EQUIP DE RMN VNMRS DE 500 MHZ

Es procedirà a obrir una convocatòria pels usuaris de l'UB que necessitin treballar en mode manual amb l'equip VNMRS500.

### 3.1 Requisits dels candidats

L'espectròmetre de RMN VNMRS500 està ubicat a la planta -2 del soterrani de RMN del PCB i comparteix la sala s2C31 amb el GHZ. Això condiona el nombre màxim d'usuaris que poden accedir el VNMRS 500 i per tant només s'acceptaran les candidatures que s'adaptin als requisits

- Els grups que necessitin accedir regularment a aquest equip hauran de sol·licitar-ho indicant els tipus d'experiments que preveuen realitzar i les raons que impedeixen fer aquests experiments en altres equips.
- El grup de recerca haurà de designar **1 sol usuari**, que serà l'única persona autoritzada a entrar **la sala s2C31**, treballar amb l'equip i realitzar els experiments pel seu grup.
- Els candidats han de ser com a mínim estudiants de doctorat i l'hauran d'acreditar.
- Els candidats interessats hauran d'enviar un correu a [info@rmn.ub.edu](mailto:info@rmn.ub.edu) amb un document on es detalli 1) Justificació de l'ús de l'equip 2) Si te coneixements previs de maneig d'equips de RMN 3) Estimació del nombre de mostres i periodicitat 4) Formació acadèmica o relació amb l'UB



### 3.2 Acceptació dels candidats

- Un cop acceptada la sol·licitud de l'usuari, es farà un curs presencial d'utilització de l'equip adaptat a les necessitats d'utilització que hagi fet constar en la seva sol·licitud.
- L'usuari haurà de **passar una prova teòrica i practica que demostrï la seva capacitat d'utilitzar l'equip de forma independent.**
- Els usuaris que ja estiguin formats per a la utilització d'equips Varian en mode manual poden optar per demanar de passar a la prova de capacitació sense haver de seguir el curs.
- A l'acabar el candidat usuari serà acreditat com a usuari i tindrà un login i password d'accés que serà únic per a cada grup.
- **El manteniment de l'acreditació estarà supeditat a que es comprovi l'accés regular de l'usuari al servei** i a que se'n faci un bon ús que no posi en perill la integritat de l'equip o les altres instal·lacions de la Unitat de RMN.

### 4-SISTEMA DE RESERVA I PERIODE DE UTILITZACIÓ

- Hi haurà un sistema de reserva de temps de l'equip.
- Els bloc mínim de reserva serà de 5 h i s'adjudicaran als usuaris acreditats que ho sol·licitin. Es carregarà el cost de tot el període, independentment de si s'usa totalment o no, excepte que es cedeixi el temps restant a un altre usuari acreditat, que únicament haurà de pagar el cost del temps utilitzat fins al final de la reserva.
- Per defecte els períodes d'accés seran: 9 a 14h i de 14 a 19 h però es poden flexibilitzar i acumular per optimitzar l'accés o el disseny experimental. En cas de conflicte serà el personal de la unitat qui autoritzarà, o no, l'accés en franges de temps diferents en funció de les demandes d'altres usuaris o les necessitats del servei.
- Excepte imprevistos, de manera regular, els dijous la reserva començarà a partir de les 11h per les càrregues de nitrogen. La càrrega periòdica d'heli alterarà també el calendari modulad per l'entrega del mateix i la resta de càrregues criogèniques
- Durant els caps de setmana l'equip no estarà disponible
- Durant els períodes de tancament de la UB l'equip tampoc no estarà disponible

### 5-RESTRICCIONS D'ACCÉS A LA SALA

- A la sala s2C31 que allotja el VNMRS500 i el GHZ mai no podran coincidir dos usuaris siguin o no del mateix grup.
- L'usuari acreditat del grup de recerca podrà estar acompanyat per un altre usuari del mateix grup que s'ubicarà a la sala de distribució però que no podrà accedir a la sala s2C31

### 6-CONSIDERACIONS FINALS



L'equip VNMRS500 es va instal·lar l'any 2009. Aquest equip ja no es fabrica i no hi ha recanvis de les seves peces en cas s'avaria. Els CCiTUB faran el que estigui a les seves mans per mantenir l'equip operatiu però no es pot garantir. No està previst que aquest equip sigui substituït quan deixi de funcionar. Per tant, és molt important que els usuaris en tinguin cura.