



Regolamento NMR Dipartimentale Bruker 400 MHz

Il servizio di risonanza magnetica nucleare, Nuclear Magnetic Resonance - NMR, dispone di una strumentazione 400 MHz Bruker Avance III che utilizza un magnete superconduttore a 9,4 T (400 MHz per il protone) con teste di misura specifiche (carbonio e idrogeno), dispone di software e di hardware in grado di eseguire gli esperimenti multidimensionali, omonucleari ed eteronucleari inversi più comuni anche in relazione alla presenza di un efficiente sistema di generazione di gradiente di campo magnetico.

Responsabili

Il responsabile scientifico dello strumento è Francesca Leonelli (francesca.leonelli@uniroma1.it) ed il responsabile tecnico Giorgio Capuani (giorgio.capuani@uniroma1.it).

Accesso al servizio

Lo strumento è a disposizione di tutti i componenti del Dipartimento di Chimica, del personale Sapienza e anche di persone esterne all'Ateneo previo pagamento o di una quota associativa o del singolo spettro (vedi quote differenziate per tipologia in calce). La quota associativa dovrà essere versata a inizio anno. Lo strumento è a disposizione anche di persone esterne all'Ateneo previa stipula di una convenzione conto terzi. Le quote acquisite serviranno alla gestione ordinaria annuale dello strumento che prevede l'acquisto di gas criogenici, bombole di gas, assistenza per la ricarica dell'elio e un servizio di manutenzione.

L'accesso al laboratorio NMR (Edificio Cannizzaro CU014, stanza 065) è regolamentato secondo le disposizioni Sapienza.



Il personale strutturato interno a Sapienza (docenti, assegnisti di ricerca, borsisti e dottorandi) può avere accesso direttamente allo strumento previa formazione che avverrà su richiesta dell'interessato al responsabile scientifico. Coloro che vorranno effettuare spettri senza usare direttamente lo strumento dovranno farne richiesta al responsabile scientifico, che, in tempi da concordare in funzione della richiesta, provvederà a fare l'esperimento.

Prenotazione

La prenotazione delle fasce per coloro che utilizzano direttamente lo strumento è regolamentata attraverso un foglio Google condiviso. Il tempo macchina è suddiviso in

- 10 fasce giornaliere di un ora ciascuna dalle 8 alle 18
- una fascia notturna che inizia dalle 18 di un giorno fino alle 8 del giorno successivo
- il fine settimana che inizia dalle 18 del venerdì fino alle 8 del lunedì.

Tutti gli utenti interni al Dipartimento di Chimica che richiedono l'accesso allo strumento dovranno partecipare attivamente alle ricariche dell'azoto liquido, che avvengono con cadenza di 10 giorni. La ricarica deve essere obbligatoriamente svolta da due operatori per ragioni di sicurezza.

Il personale esterno a Sapienza non può avere accesso direttamente alla strumentazione, ma sarà assistito da personale strutturato che effettuerà gli spettri.

Spettri

Gli spettri sono forniti in formato elettronico, sotto forma delle relative cartelle Bruker Topspin, senza ulteriori elaborazioni. Le cartelle sono trasferite su



opportuno supporto elettronico fornito dal richiedente, che ne deve previamente verificare l'esenzione da virus informatici.

Quote per l'utilizzo dello strumento

1. Personale interno al Dipartimento di Chimica

a. Costo per spettri singoli

Questi spettri verranno effettuati da personale strutturato abilitato all'uso dello strumento.

Tipo di spettro	Quantità campione in mmoli	Costo campione pronto* in euro	Costo campione da preparare** in euro
^1H	$\geq 0,1$	10	20
^{13}C	$\geq 0,2$	10	20
^1H	$<0,1$	30	40
^{13}C	$<0,2$	40	50
HSQC	$\geq 0,1$	30	40
HMBC	$\geq 0,2$	100	110
COSY	$\geq 0,1$	100	110
NOESY	$\geq 0,1$	100	110

*La preparazione dei campioni richiede la solubilizzazione del campione da analizzare in 0,6 ml di solvente deuterato.

**Il tubo NMR (diametro 5 mm) dovrà essere fornito insieme al campione.

Il costo totale del servizio sarà quantificato in fase preventiva attraverso la sottoscrizione di un apposito modulo nel quale saranno indicati anche i riferimenti necessari per l'addebito delle quote.

b. Costo dell'abbonamento annuale:

Numero di fasce orarie mensili	Quota (€)
Fino a 2	250
Fino a 5	500
Accesso libero	900*

*oltre alla quota fissa di 900 euro ci sarà una quota variabile a seconda dell'utilizzo. La quota a consumo non può essere quantificata esattamente ma presumibilmente può essere compresa tra 300 e 1500 euro. Le quote per l'accesso libero (fissa e a consumo) sono stimate in base all'attuale numero di partecipanti alle spese e possono quindi essere soggette a variazioni.

Il pagamento delle quote fisse degli abbonamenti sarà disposto in fase preventiva attraverso la sottoscrizione di un apposito modulo nel quale saranno indicati anche i riferimenti necessari per l'addebito delle quote. Il pagamento della quota fissa deve essere effettuato entro il 31 ottobre dell'anno di abbonamento, mentre il l'importo della quota variabile sarà definito a consuntivo in funzione dei consumi, sarà notificato all'abbonato entro il 31 gennaio dell'anno successivo e dovrà essere saldato entro mese di febbraio seguente attraverso l'impiego di un ulteriore modulo che sarà reso disponibile.

2. Personale esterno al Dipartimento di Chimica ma interno a Sapienzaa. Costo per spettri singoli



Questi spettri verranno effettuati da personale strutturato abilitato all'uso dello strumento.

Tipo di spettro	Quantità campione in mmoli	Costo campione pronto* in euro	Costo campione da preparare** in euro
^1H	$\geq 0,1$	30	40
^{13}C	$\geq 0,2$	30	40
^1H	$< 0,1$	90	100
^{13}C	$< 0,2$	90	100
HSQC	$\geq 0,1$	90	100
HMBC	$\geq 0,2$	300	310
COSY	$\geq 0,1$	300	310
NOESY	$\geq 0,1$	300	310

*La preparazione dei campioni richiede la solubilizzazione del campione da analizzare in 0,6 ml di solvente deuterato.

**Il tubo NMR (diametro 5 mm) dovrà essere fornito dal richiedente insieme al campione

Il costo totale del servizio sarà quantificato in fase preventiva attraverso la sottoscrizione di un apposito modulo nel quale saranno indicati anche i riferimenti necessari per l'addebito delle quote.

Non saranno accettate richieste di spettri per un ammontare inferiore ad € 150.

b. Costo ad abbonamento annuale.

10 fasce giornaliere da un ora al mese + due notti (14 ore ognuna) al mese: 2000 euro.

Il pagamento delle quote fisse degli abbonamenti sarà disposto in fase preventiva attraverso la sottoscrizione di un apposito modulo nel quale saranno indicati anche i riferimenti necessari per l'addebito delle quote.



3. Esterni a Sapienza

a. Costo per spettri singoli

Questi spettri verranno effettuati da personale strutturato abilitato all'uso dello strumento.

Tipo di spettro	Quantità campione in mmoli	Costo campione pronto* in euro	Costo campione da preparare** in euro
¹ H	≥ 0,1	50	60
¹³ C	≥ 0,2	50	60
¹ H	<0,1	90	100
¹³ C	<0,2	90	100
HSQC	≥ 0,1	90	100
HMBC	≥ 0,2	300	310
COSY	≥ 0,1	300	310
NOESY	≥ 0,1	300	310

*La preparazione dei campioni richiede la solubilizzazione del campione da analizzare in 0,6 ml di solvente deuterato.

**Il tubo NMR (diametro 5 mm) dovrà essere fornito insieme al campione

Non saranno accettate richieste di spettri per un ammontare inferiore ad € 500.

b. Costo ad abbonamento annuale.

24 spettri al mese (¹H e ¹³C con quantità di campione minima di 0,02 mmoli e 0,1 mmoli rispettivamente): 2000 euro.

Questi spettri verranno effettuati da personale strutturato abilitato all'uso dello strumento. I campioni andranno consegnati dal richiedente già disciolti nel



solvente deuterato e nel tubo NMR (diametro 5 mm) che sarà riconsegnato insieme al FID dell'esperimento.

Tali attività rientrano nell'ambito delle convenzioni conto terzi.