

VNMRJ2.2C Nuevas posibilidades en el Mercury 400

Eliminación de H₂O en los espectros de RMN programados de un modo automático.

Con el nuevo sistema informático VNMRJ 2.2C es factible realizar en modo automático experimentos con supresión de las señales intensas de disolventes, como el agua, DMSO, etc. En el menú de programación se disponen dos alternativas: Experimentos con presaturación (**Presat**) o bien experimentos con pulsos selectivos (**wet1D**)

En la **figura-1** les mostramos cómo es posible obtener unos espectros de protón de una muestra de sacarosa (8 mg) disuelta en H₂O/D₂O, en proporción 20/80.

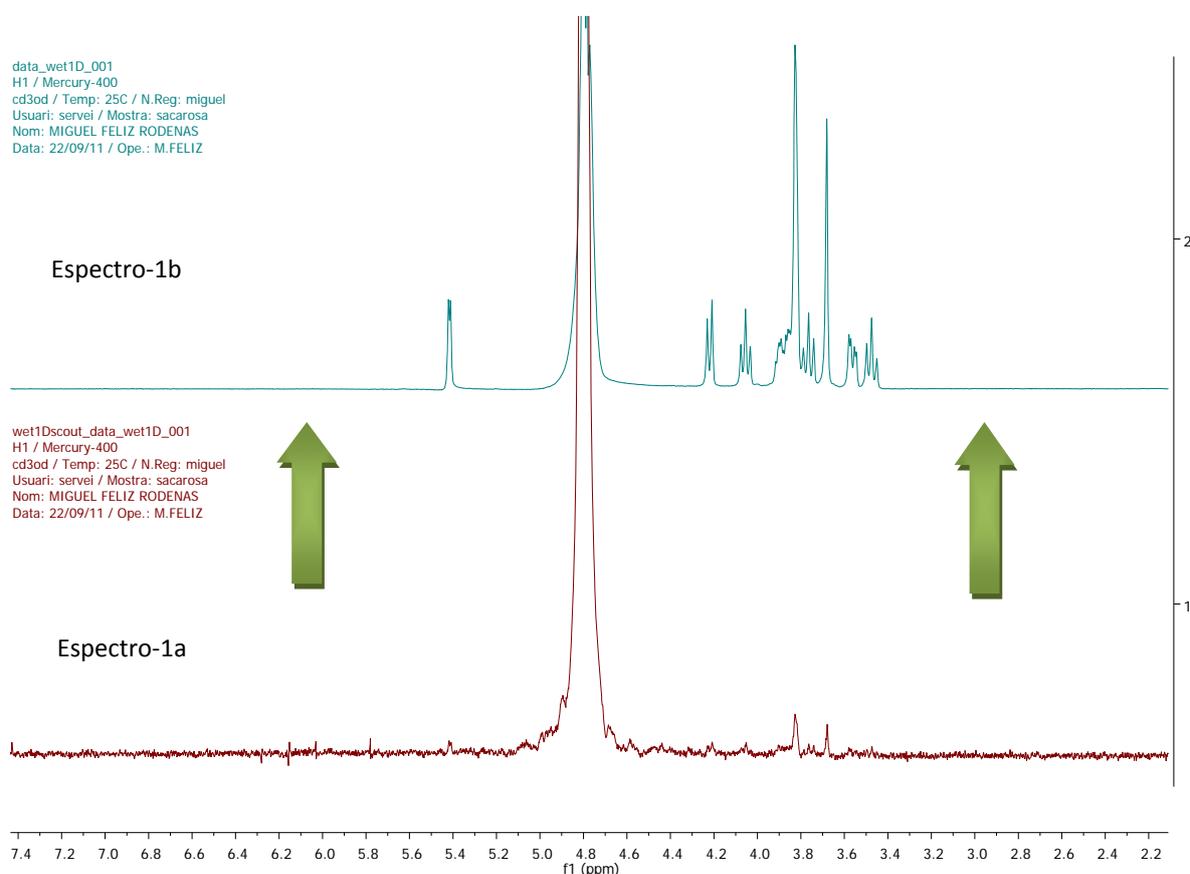


Figura-1

El espectro **1a** se ha adquirido en condiciones estándar y en él se puede ver que la gran intensidad de la señal del agua impide la detección de las señales de baja intensidad (problema de "dynamic range"). El espectro **1b** se ha adquirido con la secuencia wet1D que permite reducir notablemente la señal del agua. En este espectro, aun siendo importante la señal del agua, se puede observar con claridad las señales de la sacarosa, incluso el doblete del protón anomérico próximo al H₂O.

Sin necesidad de hacer operaciones adicionales, se puede programar un experimento de 2D como el gCOSY. Los parámetros para la supresión de agua los toma del experimento wet realizado previamente, por lo que únicamente debe indicarse el número de acumulaciones y el de incrementos. En la figura 2 se puede ver el mapa de correlación resultante, en el que la señal del agua residual no impide establecer las relaciones entre los protones de la sacarosa.

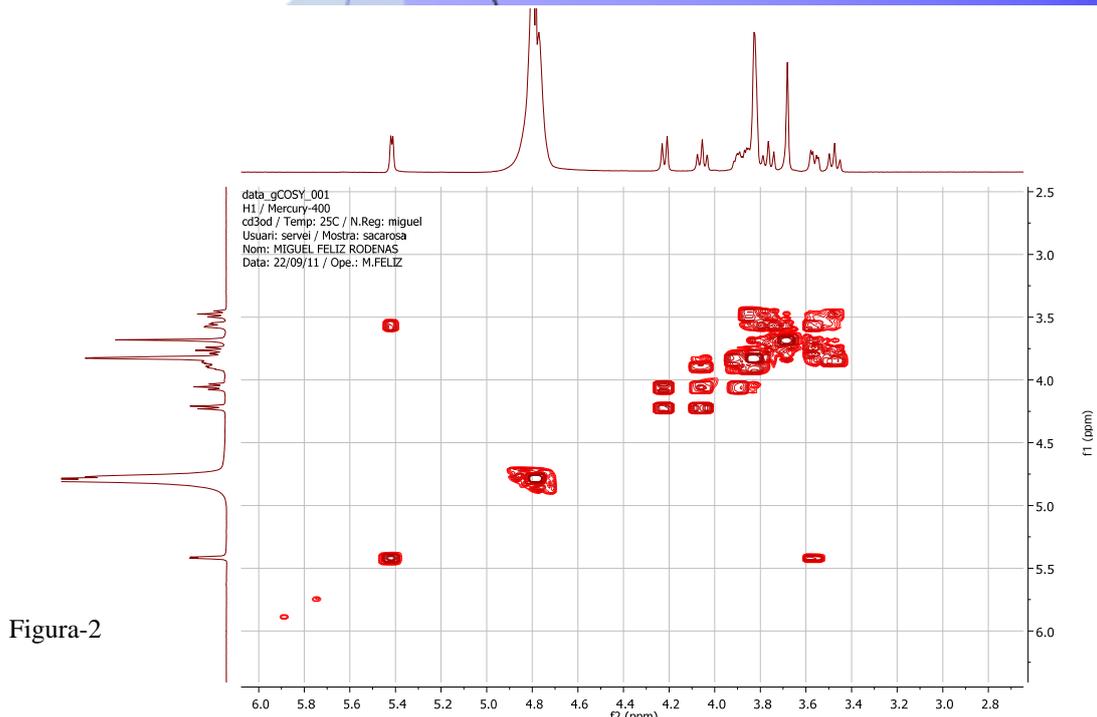


Figura-2

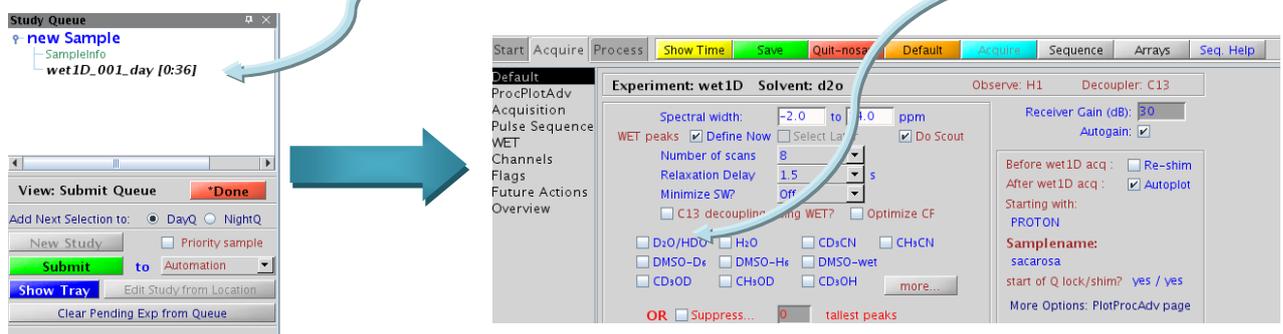
El tiempo de los dos experimentos ha sido aproximadamente unos 15 minutos. El proceso de programación es rápido y sencillo. **Los pasos clave son:**

Selección de la pestaña del experimento wet1D



Ajuste de condiciones del wet: doble click en el exp programado, parte izquierda de la pantalla.

Selección del disolvente a eliminar (en este caso D2O/H2O)



Reajuste de las acumulaciones en caso necesario, comprobación tiempo del experimento y finalizar salvando las condiciones.

El experimento COSY se programa del modo habitual, no siendo necesario modificar las condiciones de la supresión del agua u otro disolvente.

